

THÈSE

DE DOCTORAT D'ÉTAT ES-SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE A LA
FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY

PAR
Pierre CAMUS
LABORATOIRE AIMÉ COTTON
C. N. R. S.

POUR OBTENIR
LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES

Sujet :

CLASSIFICATION DES SPECTRES D'ARC ET D'ETINCELLE DU
THULIUM PAR L'ETUDE DE LA STRUCTURE ZEEMAN DES RAIES ET
L'INTERPRETATION DES CONFIGURATIONS ELECTRONIQUES.

ETUDE DES SPECTRES D'ABSORPTION DE L'YTTERBIUM, DU
LUTECIUM ET DU THULIUM ENTRE 2700 Å ET 1900 Å.

SOUTENUE LE 2 mars 1971 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

M. P. JACQUINOT : PRÉSIDENT

M. J. BLAISE
M. A. R. EDMONDS
M. R. LENNUIER } EXAMINATEURS

THÈSE

DE DOCTORAT D'ÉTAT ES-SCIENCES PHYSIQUES

PRÉSENTÉE A LA
FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY

PAR
Pierre CAMUS
LABORATOIRE AIMÉ COTTON
C. N. R. S.

POUR OBTENIR
LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES

Sujet :

CLASSIFICATION DES SPECTRES D'ARC ET D'ETINCELLE DU
THULIUM PAR L'ETUDE DE LA STRUCTURE ZEEMAN DES RAIES ET
L'INTERPRETATION DES CONFIGURATIONS ELECTRONIQUES.

ETUDE DES SPECTRES D'ABSORPTION DE L'YTTERBIUM, DU
LUTECIUM ET DU THULIUM ENTRE 2700 Å ET 1900 Å.

SOUTENUE LE mars 1971 DEVANT LA COMMISSION D'EXAMEN

M. P. JACQUINOT : PRÉSIDENT

M. J. BLAISE	}	EXAMINATEURS
M. A.R. EDMONDS		
M. R. LENNUIER		



R E M E R C I E M E N T S

Ce travail a été effectué au Laboratoire Aimé Cotton au cours des années 1964-1970. Je prie Messieurs les Professeurs P. JACQUINOT et R. CHABBAL de bien vouloir accepter l'expression de mes remerciements pour l'accueil et le soutien permanent qu'ils m'y ont témoigné.

Que Monsieur J. BLAISE, Directeur de Recherche au C.N.R.S., veuille trouver ici l'expression de mes sentiments dévoués et reconnaissants pour m'avoir initié à la classification des spectres et encouragé de ses précieux conseils tout au long de ce travail.

Je tiens à exprimer ma gratitude à Messieurs les Docteurs F.S. TOMKINS et M. FRED d'Argonne National Laboratory pour leur accueil chaleureux et les conditions de travail exceptionnelles qu'ils m'ont offerts dans leur laboratoire au cours du séjour de trois mois que j'y ai effectué en 1968.

Ma reconnaissance va également au Docteur J. SUGAR du National Bureau of Standards qui, dans le cadre d'une collaboration entre nos deux laboratoires, a mis à notre disposition les mesures précises des longueurs d'onde du thulium.

J'aimerais aussi remercier tous les chercheurs et techniciens du Laboratoire qui ont participé, directement ou indirectement, à ce travail : J. VERGES dont les premières mesures des longueurs d'onde du thulium effectuées dans l'infrarouge m'ont permis d'entreprendre la classification de ce spectre; les membres du groupe de Théorie,

J. BAUCHE et S. FENEUILLE qui ont toujours su, par des explications très claires, adapter les fondements théoriques des méthodes de Racah aux problèmes rencontrés dans la classification, Y. BORDARIER et A. CARLIER qui ont contribué efficacement à l'application de ces méthodes par des programmes de calcul de plus en plus raffinés; enfin, R. BARONNET qui a fabriqué d'excellentes sources de lumière. Que chacun veuille bien accepter l'expression de ma profonde gratitude.

Ce travail n'aurait pu être mené à bien sans la diligence et la célérité des ingénieurs et opérateurs du Centre de Calcul de l'UNIVAC 1108 de la Faculté des Sciences d'ORSAY : qu'ils trouvent ici l'expression de toute ma reconnaissance.

Enfin, je prie Mesdames HAGNÈRE¹, PARIZOT, CHEVILLARD et Monsieur REY, dont les tâches furent de dactylographier et d'illustrer avec compétence ce manuscrit, d'accepter mes plus vifs remerciements.

*
* *

TABLE DES MATIERES

	Pages
<u>INTRODUCTION</u>	1
Première partie : <u>CLASSIFICATION DES SPECTRES D'ARC ET</u> <u>D'ETINCELLE DU THULIUM</u>	5
<u>CHAPITRE I</u> - METHODES UTILISEES POUR CLASSER UN SPECTRE COMPLEXE	6
I - 1 - <u>INTRODUCTION</u>	6
I - 2 - <u>MESURE DES LONGUEURS D'ONDE</u>	7
I - 3 - <u>DETERMINATION DE LA VALEUR DU NOMBRE QUANTIQUE</u> <u>J DES NIVEAUX PAR ANALYSE DE LA STRUCTURE HY-</u> <u>PERFINE ET DE LA STRUCTURE ZEEMAN DES RAIES</u> ...	9
1 - Structure hyperfine	10
2 - Structure Zeeman	11
I - 4 - <u>CONSTRUCTION ET INTERPRETATION DU DIAGRAMME DES</u> <u>ENERGIES D'UN ATOME</u>	16
1 - Positions relatives des configurations électro- niques de Tm I et Tm II	17
2 - Calcul empirique des états d'énergie d'une con- figuration électronique	11
<u>Généralités</u>	21
<u>Calcul des éléments de matrice de l'interaction</u> <u>électrostatique Q</u>	23
<u>Calcul des éléments de matrice de l'interaction</u> <u>spin-orbite Λ</u>	27
3 - Choix des valeurs initiales des paramètres	29

	Pages
<u>CHAPITRE II</u> - CLASSIFICATION DU SPECTRE D'ARC DE Tm	35
II - 1 - <u>DONNEES EXPERIMENTALES NOUVELLES</u>	35
II - 2 - <u>DIAGRAMME D'ENERGIE DES CONFIGURATIONS IDENTIFIEES</u>	35
II - 3 - <u>CONFIGURATIONS PAIRES</u>	42
1 - $4f^{12}5d6s^2 + 4f^{13}6s6p$	42
2 - $4f^{13}d6p$	54
3 - Liste des niveaux pairs	59
II - 4 - <u>CONFIGURATIONS IMPAIRES</u>	59
1 - $4f^{13}5d6s + 4f^{12}6s^26p$	66
2 - $4f^{12}5d6s6p$	74
3 - $4f^{13}6s7s$ et $4f^{13}6s8s$	78
4 - $4f^{13}6s6d$	94
5 - $4f^{13}6p^2$	98
6 - Liste des niveaux impairs	102
II - 5 - <u>INTENSITES DES RAIES ET DUREES DE VIE DES NIVEAUX</u>	102
1 - <u>Généralités</u>	112
2 - <u>Détermination des coefficients D_{if} et des intégrales dipolaires électriques $I(nl, n'l')$</u>	114
3 - <u>Calcul des forces de raies. Comparaison avec l'expérience des intensité, force d'oscillateur et durée de vie calculées</u>	115
<u>CHAPITRE III</u> - CLASSIFICATION DU SPECTRE D'ETINCELLE DE Tm	123
III - 1 - <u>DIAGRAMME D'ENERGIE DES CONFIGURATIONS IDENTIFIEES</u>	123
III - 2 - <u>CONFIGURATIONS PAIRES</u>	126

	Pages
1 - $4f^{12}5d6s$	126
2 - $4f^{12}5d^2$	126
3 - $4f^{12}(5d + 6s)^2 + 4f^{13}6p$	127
4 - Liste des niveaux pairs	143
III - 3 - <u>CONFIGURATIONS IMPAIRES</u>	143
1 - $4f^{13}(6s + 5d)$	143
2 - $4f^{12}(5d + 6s)6p$	153
3 - $4f^{13}7s$	169
4 - Liste des niveaux impairs	171
<u>CONCLUSION</u>	171
Deuxième partie : <u>SPECTRES D'ABSORPTION DE L'YTTERBIUM,</u>	
<u>DU LUTECIUM ET DU THULIUM</u> 181	
<u>CHAPITRE I</u> - GENERALITES SUR LES SPECTRES D'ABSORPTION ET LA	
METHODE EXPERIMENTALE 182	
I - 1 - <u>INTRODUCTION</u>	182
I - 2 - <u>DETERMINATION DE LA LIMITE D'UNE SERIE</u>	183
I - 3 - <u>DISPOSITIF EXPERIMENTAL</u>	185
<u>CHAPITRE II</u> - SPECTRES D'ABSORPTION OBSERVES ET INTERPRETES ... 190	
II - 1 - <u>SPECTRE DE L'YTTERBIUM</u>	190
II - 2 - <u>SPECTRE DU LUTECIUM</u>	202
II - 3 - <u>SPECTRE DU THULIUM</u>	228
<u>CONCLUSION</u>	246
<u>ANNEXE</u>	249
<u>BIBLIOGRAPHIE</u>	257



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41543719_0015

I N T R O D U C T I O N

Le but de notre travail a été double : d'une part, poursuivre la classification des spectres de Tm I et II, d'autre part, mesurer et interpréter les spectres d'absorption de quelques terres rares dans l'ultraviolet, en particulier ceux de Yb, Lu et Tm.

La classification de Tm I et II a commencé en 1942 avec W.F. MEGGERS [36] qui a mis en évidence les multiplets 2F et 1,3F des configurations fondamentales $f^{13}s^2$ et $f^{13}s$ en recherchant les différences, qui se retrouvent plusieurs fois, entre les nombres d'onde des raies intenses. En 1963, R. VETTER [14] a mesuré les structures hyperfines de 58 raies et déterminé les valeurs de J et écarts hyperfins de 17 niveaux pairs et 10 niveaux impairs de Tm I. En 1962, N. SPECTOR [7] a utilisé les méthodes de G. RACAH pour prévoir les énergies des configurations de Tm II et rechercher ensuite les niveaux, à l'aide d'un programme fondé sur le principe de combinaison de RITZ. Cette étude [48] a abouti en 1967 à l'interprétation de 40 niveaux profonds des sous-configurations $f^{12} (^3H_6) ds$, $f^{13} (^2F_{7/2}) p$ et $f^{12} (^3H_6) sp$ et à la mise en évidence des trois premiers niveaux 3H_6 , 3H_5 et 3F_4 de $f^{12}s^2$.

C'est en 1964 que nous avons entrepris, avec J. BLAISE [37], la classification de Tm I et II grâce à deux éléments nouveaux : les spectrogrammes Zeeman (2700-9000 Å) enregistrés par M. FRED et F.S. TOMKINS à Argonne National Laboratory, et la liste des longueurs d'onde infrarouges

(0,8 - 2,5 μ) mesurées par J. VERGES [13] avec un spectromètre SISAM.

L'étude théorique des configurations électroniques en couplage intermédiaire, suivant les méthodes de G. RACAH, s'est imposée pour deux raisons : d'une part, l'étude du déplacement isotopique, si précieuse pour déterminer la nature des configurations, est impossible car le thulium ne possède qu'un seul isotope stable 169, d'autre part, la connaissance des valeurs de J et g est insuffisante pour interpréter les niveaux d'énergie car on est loin du couplage LS. L'utilisation simultanée, des calculs empiriques pour rechercher les niveaux d'énergie et de l'analyse de la structure Zeeman des raies pour vérifier les niveaux trouvés, nous a permis de mettre en évidence les configurations profondes mélangées $f^{13}sp + f^{12}ds^2$ [40] et $f^{13}ds + f^{12}s^2p$ [13] de Tm I, ainsi que la configuration impaire profonde $f^{13}d$ de Tm II.

Depuis octobre 1966, notre travail a été grandement facilité du fait que nous avons disposé des listes séparées des raies d'arc et d'étincelle de thulium, mesurées avec une grande précision par W.F. MEGGERS et J. SUGAR du National Bureau of Standards; la classification des spectres de thulium s'est alors poursuivie conjointement entre le laboratoire Aimé Cotton et le National Bureau of Standards et il en résulte la mise en évidence des configurations élevées des deux spectres.

La deuxième partie relative aux spectres d'absorption de terres rares, a débuté au cours d'un séjour de trois mois, juillet à octobre 1968, effectué à Argonne National Laboratory. La technique du four à induction développée par F.S. TOMKINS, nous permis d'obtenir une "atomisation" homogène en partant de quelques milligrammes des substances les plus réfractaires. Les spectres d'absorption des vapeurs métalliques de l'ytterbium, du lutécium et du thulium ont été observés dans d'excellentes conditions entre 2750 Å et 1900 Å. La mesure des longueurs d'ondes absorbées et l'interprétation des séries de RYDBERG, en respectant l'hypothèse de la variation lente du défaut

quantique pour les termes élevés, nous ont conduit à déterminer avec une grande précision les potentiels d'ionisation de l'ytterbium, du lutécium et du thulium.

P R E M I E R E P A R T I E

{ CLASSIFICATION DES SPECTRES D'ARC ET D'ETINCELLE DU THULIUM }

CHAPITRE I

METHODES UTILISEES POUR CLASSER UN SPECTRE COMPLEXE

I - 1 - INTRODUCTION

L'analyse des spectres "complexes" est un travail long, souvent ingrat, qui nécessite l'accumulation et le traitement de données expérimentales très nombreuses. Pour reconstituer les états d'énergie d'un atome à plusieurs électrons optiques, il est nécessaire de passer en revue quelques milliers de raies afin d'en chercher les caractéristiques communes qui les connecteront entre elles, et d'en déduire le diagramme des niveaux qui les ont produites. Dans la série des lanthanides, ce travail a été entrepris dès 1928 par A.S. KING qui a classé les raies en fonction de la température nécessaire à leur apparition dans une vapeur excitée thermiquement.

En 1954, L.F.H. BOVEY et W.R.S. GARTON ont sélectionné les raies partant des niveaux profonds de T_m , en mesurant les fréquences lumineuses absorbées après la traversée de la vapeur atomique par un spectre continu de lumière blanche. Ces expériences sélectives, qui font intervenir les niveaux profonds, sont devenues insuffisantes pour dresser un schéma plus complet des niveaux d'énergie; un schéma qui puisse rendre compte des milliers de fréquences émises par les atomes de T_m excités, dans un champ électrique haute fréquence ou un arc électrique de grande intensité.

Dans ces conditions, la densité des raies émises peut atteindre deux à trois unités par $\overset{\circ}{\text{Å}}$ et impose l'utilisation de disperseurs à grand

pouvoir de résolution. Une conséquence directe de l'abondance des résultats est l'évolution de la "technique" de classification : de l'application du principe élémentaire de combinaison de RITZ (recherche des différences), à l'étude des structures hyperfines et des structures Zeeman des raies pour déterminer la valeur de J des niveaux intervenant dans une transition. L'utilisation de la méthode empirique de G. RACAH pour calculer les énergies des configurations électroniques, a marqué une étape décisive dans la classification des spectres complexes.

Nous rappelons, dans ce premier chapitre, les progrès réalisés dans l'observation et la mesure des spectres atomiques et les méthodes employées pour l'analyse de Tm I et II .

I - 2 - MESURE DES LONGUEURS D'ONDE

Dans la région $2500 - 9000 \text{ \AA}$, tous les spectres étudiés au laboratoire ont été pris par M. FRED et F.S. TOMKINS sur le grand spectrographe PASCHEN-RUNGE [1] à Argonne National Laboratory. Les sources sont des lampes sans électrodes excitées à l'aide d'un générateur d'ondes de fréquence égale à 2450 Mc . Elles sont fabriquées au laboratoire par R. BARONNET, suivant la technique décrite par F.S. TOMKINS et M. FRED [2] et contiennent quelques milligrammes d'iodure de terre rare. Ces sources de grande brillance émettent principalement les raies des spectres neutre et une fois ionisé. Le temps d'exposition des plaques photographiques est en moyenne de vingt minutes pour un spectre. Le pointé de chacune des raies par rapport au spectre de référence demande, quant à lui, une à deux années de travail avec un comparateur à contrôle manuel. Il est souhaitable d'utiliser un comparateur automatique comme ceux décrits par D.W. STEINHAUS [3] et R. HOEKSTRA [4], pour accélérer la cadence de dépouillement et augmenter la précision des pointés. L'avancement automatique de la plaque photographique sous le condenseur, associé au stockage continu des informations sur une bande magnétique, apporte un gain de temps très appréciable. Les données de la bande sont traitées

ultérieurement par un ordinateur électronique qui établit la liste des longueurs.

Les recherches poursuivies au laboratoire depuis une dizaine d'années dans le domaine infrarouge $0,9 - 2,5 \mu$, ont donné des résultats fructueux pour la classification des spectres des lanthanides et actinides. Ainsi que nous le décrirons plus loin, les raies visibles de ces spectres sont, dans un premier temps, classées en deux systèmes distincts (A et B) de niveaux d'énergie. La connexion de ces deux systèmes, située le plus souvent dans le domaine infrarouge, reste l'objectif à atteindre pour établir définitivement le schéma cohérent des niveaux d'énergie.

Un spectre SISAM de faible résolution, dont le principe a été décrit par P. CONNES [5], a été consacré pendant cinq ans à cette tâche [6]. Cet appareil séquentiel nécessite des durées d'enregistrement et de mesures très longues et la spectrométrie de Fourier développée par P. et J. CONNES et leurs collaborateurs [7] le remplacera avantageusement dans un avenir proche.

Pour les spectres de Tm I et II, le tableau 1 permet de comparer le nombre des raies observées avant 1965 à celui dont nous disposons aujourd'hui.

Afin de démêler ces écheveaux de plusieurs milliers de longueurs d'onde, nous aborderons, dans le paragraphe suivant, les critères qui nous permettront de corréler les raies aux niveaux d'énergie responsables de leur émission.

TABLEAU 1 - Nombre de raies observées dans Tm I et II

domaine visible ($2500 \text{ \AA} - 9000 \text{ \AA}$)

Source	Four KING	Absorption	Arc (10A-220v)	Flamme	Tube sans électrodes Arc pulsé
Référence	1941 [8]	1954 [9]	1961 [10]	1964 [11]	1967 [12]
Nombre de raies	354	88	231 (I) 660 (II)	82	4310 (I) 12740 (II)

domaine infra-rouge ($0,9\mu - 2,5\mu$)

Source	Tube sans électrodes
Référence	1969 [13]
Nombre de raies	537

I - 3 - DETERMINATION DE LA VALEUR DU NOMBRE QUANTIQUE J DES NIVEAUX PAR ANALYSE DE LA STRUCTURE HYPERFINE ET DE LA STRUCTURE ZEEMAN DES RAIES

Sous l'effet d'une perturbation magnétique ou électrique, les niveaux fins d'un atome se décomposent en plusieurs sous-niveaux dont les propriétés caractérisent d'une part, la nature et l'amplitude de la perturbation, d'autre part, la valeur du nombre quantique J des états stationnaires. L'interaction magnétique entre le noyau et les électrons, qui donne naissance à la structure complexe naturelle des raies ou "structure hyperfine", constitue la perturbation interne principale.

1 - Structure hyperfine

Quand le spin nucléaire I d'un atome n'est pas nul, le moment magnétique propre de son noyau interagit avec le champ magnétique créé par les électrons optiques en mouvement. Chaque niveau fin de nombre quantique J , se décompose en plusieurs sous-niveaux hyperfins de nombre quantique F , tel que $\vec{F} = \vec{I} + \vec{J}$. Dans l'hypothèse où I est connu et plus grand que J , le nombre quantique F prend $2J + 1$ valeurs : il suffit de compter les niveaux hyperfins pour déterminer J . Dans le cas contraire où $I < J$, celui de Tm , le nombre des niveaux hyperfins est égal à $2i + 1$ et, pour remonter à la valeur J , il est nécessaire de comparer entre elles les intensités des composantes hyperfines. Cette méthode, employé avec succès par R. VETTER [14] pour classer les raies fortes du spectre de Tm , repose sur des mesures très précises d'intensité.

La figure 1 représente la structure hyperfine ($I = \frac{1}{2}$) de la raie $5566 \text{ \AA}$ de ^{169}Tm demeurée sans classification.

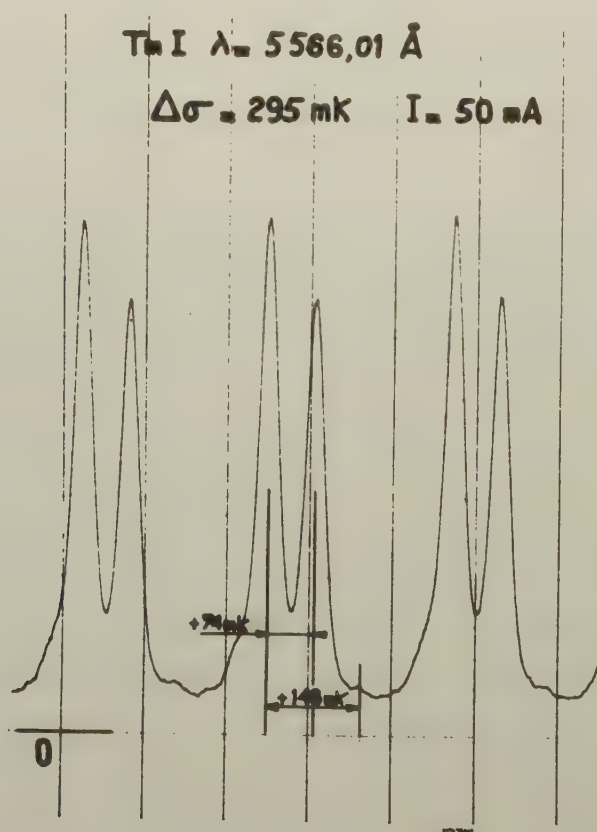


fig. 1

Le rapport ρ des intensités des composantes mesuré par R. VETTER, égal à $1,15 \pm 0,02$, présumait une transition $11/2+1 - 13/2+1$. Or cette raie est classée aujourd'hui comme une transition $9/2 - 11/2$ dont le rapport ρ calculé est $1,204$. Cet exemple, résume bien les difficultés rencontrées pour classer un spectre à l'aide des seules structures hyperfines des raies. Nous voulons montrer, au cours du paragraphe suivant, la supériorité de l'effet Zeeman pour déterminer les valeurs de J .

2 - Structure Zeeman

Un atome soumis à un champ extérieur $\mathcal{H}$ constant admet l'hamiltonien suivant :

$$H_T = H + \frac{e}{2mc} \hbar (\vec{L} + 2\vec{S})$$

où le premier terme H est l'hamiltonien de l'atome libre et le second terme, l'hamiltonien magnétique H_{mag} perturbateur.

Dans le cas de l'effet Zeeman (champ faible), le terme H_{mag} est petit devant H et chaque niveau fin E_J se décompose en $2J + 1$ sous niveaux E_{M_J} tels que, l'écart du sous-niveau magnétique E_{M_J} au niveau sans champ E_J est donné par la relation :

$$E_{M_J} - E_J = M_J g \mu_B \mathcal{H}$$

avec M_J le nombre quantique qui représente la projection J_z de $\vec{J}$ sur l'axe du champ magnétique appliqué, μ_B le magnéton de Bohr

et $g = \frac{\langle \alpha J || L + 2S || \alpha J \rangle}{\langle J || J || J \rangle}$ le facteur de Landé du niveau E_J .

D'après cette relation, deux remarques s'imposent : la dégénérescence $2J + 1$ des états stationnaires $\langle \alpha J |$ est levée par l'introduction du champ magnétique extérieur; la structure Zeeman des niveaux est caractéristique des fonctions d'ondes $\langle \alpha J |$ par l'intermédiaire du facteur de Landé g .

Quand les fonctions propres de H sont très proches des fonctions pures LS (couplage Russell-Saunders), les facteurs de Landé g sont donnés par la relation simple :

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} .$$

Ces valeurs de g en couplage LS ont été tabulées par C.E. MOORE [15], elles permettent souvent l'identification des niveaux. En général, le couplage physique est intermédiaire entre les couplages extrêmes LS et JJ et les facteurs de Landé seront calculés à partir des fonctions propres de H , exprimées comme les combinaisons linéaires des fonctions de base LS.

Les règles de sélection sur J ($\Delta J = 0, \pm 1$ et transition $0 \rightarrow 0$ interdite) ne sont pas modifiées par l'introduction du champ magnétique.

L'intensité d'une transition Zeeman est donnée par :

$$I_{\text{mag}} = \langle \alpha J M_J | \vec{e} \cdot \vec{r} | \alpha' J' M_J' \rangle^2$$

Le vecteur $\vec{r}$ est un tenseur $\underline{T}^{(k)}$ de rang k égal à 1 dont les trois composantes $T_q^{(1)}$ (q variant par valeurs entières de $-k$ à $+k$) forment la base de la représentation irréductible $\mathcal{D}_1$ du groupe de rotation fini R_3 .

En appliquant le théorème de Wigner-Eckart et pour k égal à 1, la condition de non-nullité du symbole $3J, -M_J + q + M_J, = 0$, entraîne les règles de sélection suivantes :

Pour $q = 0$ $M_J' = M_J$ $\Delta M = 0$; la vibration est polarisée rectilignement parallèle à la direction z du champ magnétique (composante π) .

Pour $q = \pm 1$ $M_J' = M_J \pm 1$ $\Delta M = \pm 1$, la vibration est circulaire (droite ou gauche dans le plan perpendiculaire au champ magnétique (composante σ)).

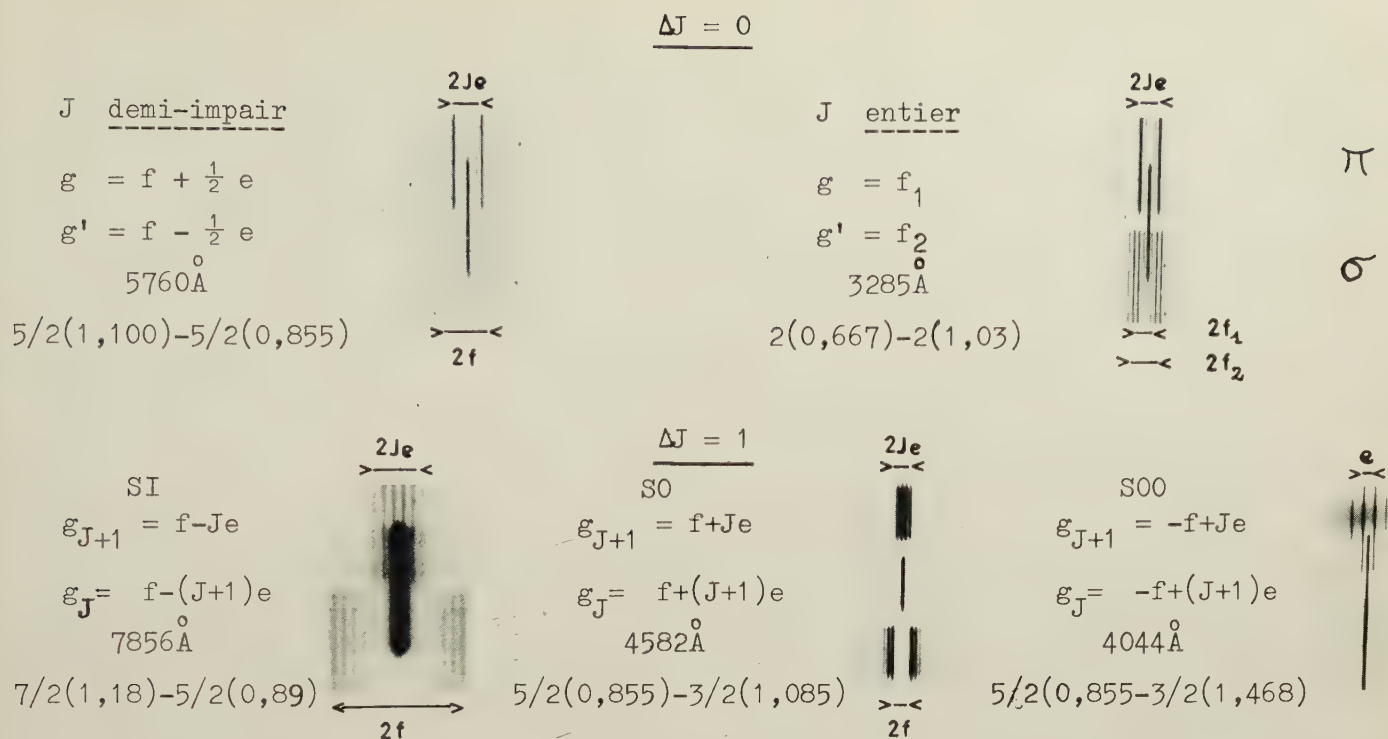


Figure 2. Différents types de structure Zeeman résolue dans Tm .

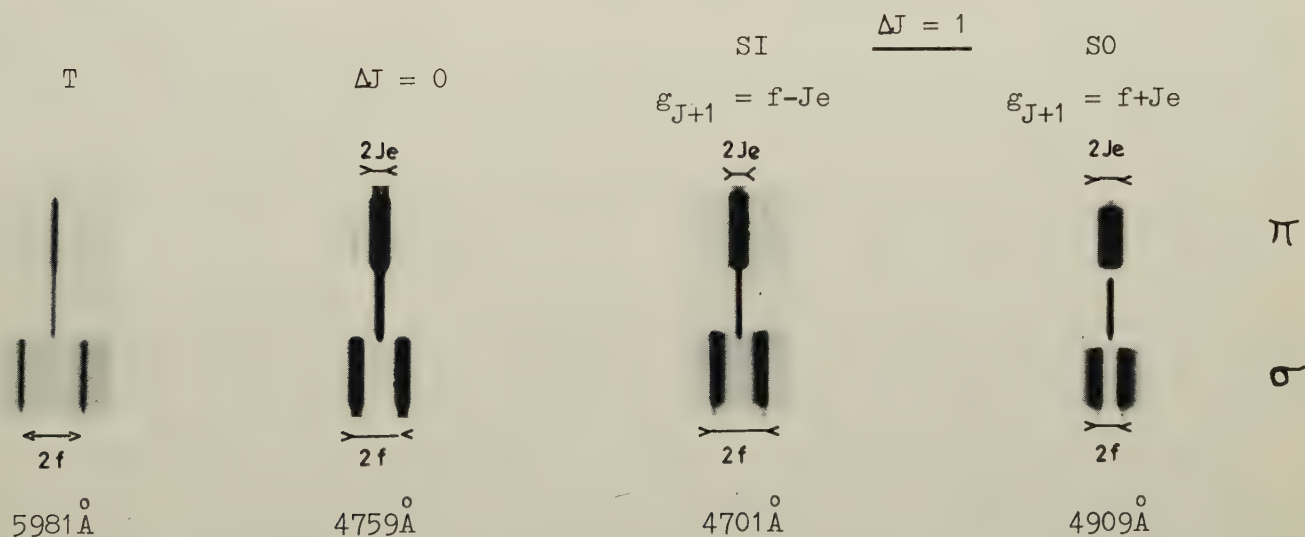


Figure 3. Différents types de structure Zeeman non résolue dans Tm .

En explicitant le symbole $3j$, $\begin{pmatrix} J & K & J' \\ -M_J & q & M_J' \end{pmatrix}$, on retrouve les intensités relatives des transitions Zeeman, données par E.U. CONDON et G.H. SHORTLEY [16] au paragraphe 4¹⁶.

D'après les règles de sélection, le nombre des composantes d'une figure Zeeman est :

J		Composantes π	Composantes σ
entier	$\Delta J = 0$	$2J$	$4J$
demi-impair	$\Delta J = 0$	$2J + 1$	$4J$
entier ou demi-impair	$\Delta J = \pm 1$	$2J + 1$	$4J + 2$

La figure 2 rassemble les types de structures Zeeman rencontrées dans une observation de la lumière, perpendiculaire à la direction du champ magnétique.

Les valeurs des facteurs de Landé sont obtenues sur les structures résolues en pointant le centre des composantes les plus intenses, d'après les formules énoncées par M. ELYASHEVICH [17].

La figure 3 présente quelques exemples de structures non-résolues quand les facteurs de Landé sont voisins (Δg faible $\sim 0,05$). Dans ces cas nombreux, il est toujours possible de recueillir une information sur le ΔJ ou la valeur de l'un des facteurs de Landé, utilisable pour la classification de la raie.

Contrairement à la structure hyperfine, l'étude Zeeman est un moyen puissant et efficace pour classer les spectres complexes, même à partir de figures non résolues. Malheureusement pour les terres rares, dont le numéro atomique Z est impair ($I \neq 0$), l'étude Zeeman perd beaucoup de son intérêt; car à la décomposition magnétique créée par le champ extérieur, vient s'ajouter la décomposition hyperfine due aux moments magnétique et quadripolaire électrique du noyau.

Les structures Zeeman deviennent difficiles à analyser et nécessitent un calcul a priori pour déterminer la position et l'intensité de chaque composante. L'effet Zeeman de la raie $6054 \text{ \AA}$ de Am I étudiée par G. SMITH [18] en est un bel exemple. Le thulium 169 de spin $I = 1/2$, échappe partiellement à cette difficulté. Les plus grandes structures hyperfines observées par R. VETTER [14], qui sont de l'ordre du dixième du triplet normal, distordent très peu les figures Zeeman. Seule, l'incertitude sur la détermination des facteurs de Landé g , sera augmentée.

I - 4 - CONSTRUCTION ET INTERPRETATION DU DIAGRAMME DES ENERGIES D'UN ATOME

Au fur et à mesure que l'analyse des structures Zeeman progresse, il faut rechercher les termes spectraux qui correspondent aux valeurs de J et g mesurées et dresser la liste des niveaux d'énergie. En général, la structure du terme fondamental est connue à l'avance (absorption) et le survol rapide des structures Zeeman des raies de classes I et II de température, permet d'établir une première liste de niveaux excités avec les valeurs de J et g correspondantes. Ces couples de valeurs, servent à nouveau de point de départ, pour rechercher sur les spectrogrammes les structures qui font apparaître des grandeurs similaires aux incertitudes de mesure près. Par bonds ou cascades successifs, un schéma des niveaux d'énergie est établi. Pour attribuer ces niveaux aux configurations électroniques possibles, le déplacement isotopique des raies est un complément indispensable.

Le thulium ne possédant qu'un seul isotope stable 169, nous avons eu recours aux positions relatives des configurations déjà connues dans les éléments voisins, pour estimer la hauteur des configurations cherchées dans le diagramme d'énergie. Cette méthode graphique, largement répandue aujourd'hui, a été utilisée avec succès par S. GERSTENKORN [19] pour les configurations de Pu I .

1 - Positions relatives des configurations électroniques de Tm I et Tm II

Sur les figures 4 et 5 correspondant au spectre neutre et au spectre une fois ionisé, l'origine des énergies est fixée à la position du plus bas niveau des configurations $f^n s^2$ et $f^n s$ connues.

Les écarts, entre les niveaux profonds des configurations excitées et les termes fondamentaux, sont portés en ordonnée pour chaque élément. Les points expérimentaux, qui correspondent à un type de configuration donnée, sont situés sur une courbe dont la pente caractérise assez bien la nature des électrons optiques. Les deux familles de courbes, qui apparaissent suivant la structure partielle f^n ou $f^{n-1} d$ des configurations électroniques, constituent les deux systèmes de niveaux d'énergie déjà mentionnés. Les deux systèmes, dont les fondamentaux sont d'une part, $f^n s^2$ et $f^{n-1} ds^2$ pour les spectres neutres, d'autre part $f^n s$ et $f^{n-1} ds$ ou $f^{n-1} s^2$ pour les spectres une fois ionisé, sont connectés par des raies situées le plus souvent dans le domaine infrarouge. Par exemple, les connexions entre $f^4 s^2$ et $f^3 ds^2$ de Nd I [20] et, $f^9 s^2$ et $f^8 ds^2$ de Tb I [21], ont été trouvées grâce aux listes de longueurs d'onde mesurées avec le SISAM.⁽¹⁾

La forme caractéristique en "double S" des courbes $f^{n-1} d$ a déjà été observée par E. LOH [22] pour les bandes d'absorption basses $f^n - f^{n-1} d$ des ions terres rares dans les cristaux de $Ca F_2$. Des courbes identiques ont été déduites récemment des propriétés chimiques et métalliques des terres rares par L. BREWER [23]. Une configuration inconnue du spectre I, peut être déterminée à l'aide des configurations connues du spectre II et vice-versa. Le tableau 2 donne les rapports des écarts de plusieurs configurations du même type, dans les spectres I et II. Ils sont constants pour le saut électronique $s - p$ et augmentent progressivement en fonction de n , pour le saut $s - d$. Ces courbes ont permis de déterminer les positions des configurations avec une précision suffisante pour entreprendre les calculs théoriques des configurations électroniques attendues dans les spectres de Tm I et II.

(1) La connexion entre $f^{10} s^2$ et $f^9 ds^2$ de Dy I a été récemment trouvée par J.C. CONWAY et E.F. WORDEN [82].

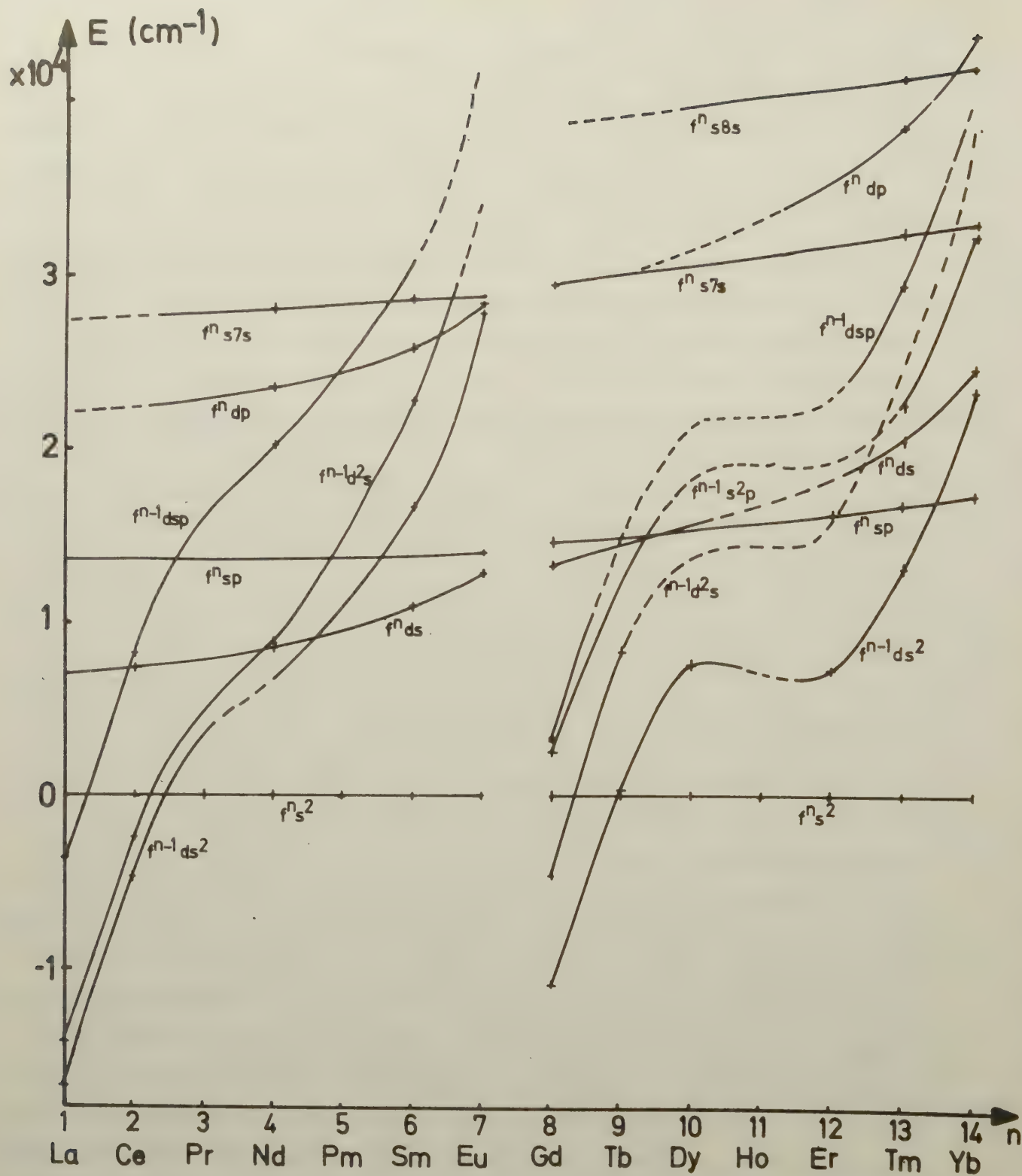


fig. 4

- Positions relatives des configurations dans les spectres neutres de terres rares

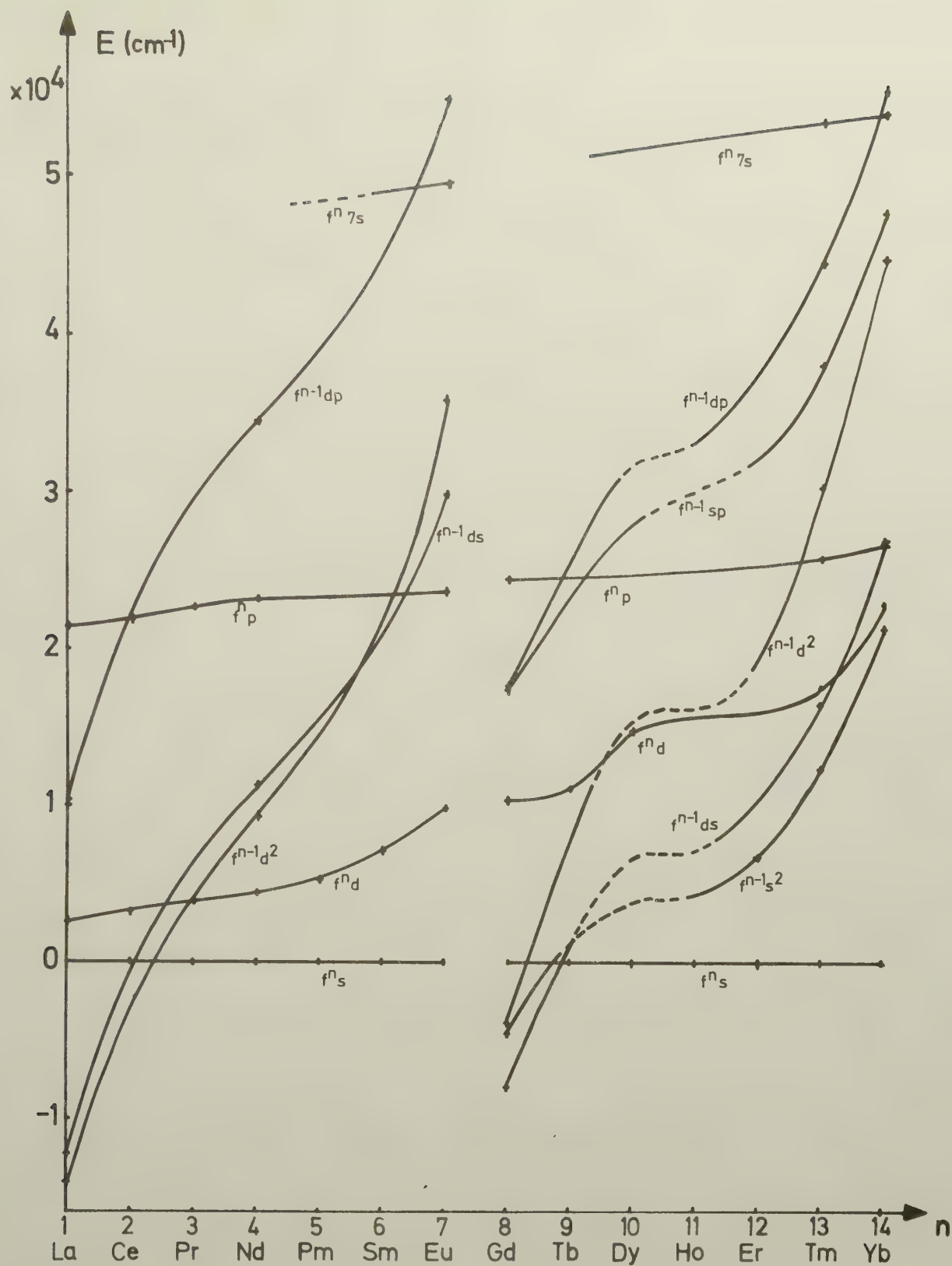


fig. 5

Positions relatives des configurations dans les spectres une fois ionisé
de terres rares

TABLEAU 2

Rapport des distances des niveaux fondamentaux de couples de configurations dans les spectres I et II .

Rapport	Eléments						
	La ---	Nd ---	Sm	Eu	Gd -----	Tm	Yb
$\frac{\Delta_I(f^{n_{sp}} - f^{n_s^2})}{\Delta_I(f^{n_{dp}} - f^{n_{ds}})}$		0,91	0,92	0,90		0,93	0,91
$\frac{\Delta_I(f^{n-1}_{dsp} - f^{n-1}_{ds^2})}{\Delta_I(f^{n_{sp}} - f^{n_s^2})}$		0,99			0,95	0,97	0,965
$\frac{\Delta_I(f^{n_{sp}} - f^{n_s^2})}{\Delta_{II}(f^{n_p} - f^{n_s})}$		0,59		0,59	0,60	0,64	0,64
$\frac{\Delta_{II}(f^{n_d} - f^{n_s})}{\Delta_I(f^{n_{ds}} - f^{n_s^2})}$	0,35	0,52	0,66	0,77	0,78	0,86	0,86

2 - Calcul empirique des états d'énergie d'une configuration électronique.

Nous rappellerons brièvement dans ce paragraphe, les grandes lignes de la méthode exposée par G. RACAH [24] et explicitée par B.R. JUDD [25].

Généralités

L'atome est un système compliqué qui, à partir des hypothèses simplificatrices suivantes :

- Noyau ponctuel, infiniment lourd, de charge Ze ,
- Electrons de masse m , de charge $-e$ et de spin $1/2$ animés

de vitesses petites devant celle de la lumière,

admet des états stationnaires qui sont solutions de l'équation de Schrödinger suivante :

$$\left[\sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{l}_i \right] \psi = E \psi$$

Le terme $Q = \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}}$ empêche la séparation des variables, il

est trop grand pour appliquer directement la théorie des perturbations. Pour éviter cette difficulté, on admet que l'électron se déplace dans un potentiel électrique central $-\frac{U(r)}{e}$.

L'hamiltonien H se sépare alors en une somme de deux termes

$H_0 + H_1$ avec :

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m} + U(r_i) \right] \quad \text{hamiltonien principal}$$

$$H_1 = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{Ze^2}{r_i} - U(r_i) \right] + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{l}_i$$

hamiltonien perturbateur.

Les valeurs propres de H_0 représentent les énergies des configurations, sommes d'énergies mono-électroniques $E_i(n_i, l_i)$ et sont caractérisées par les jeux de nombres quantiques (n_i, l_i) . Les vecteurs propres sont mis sous la forme de déterminants $\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} |\varphi_j(k_i)|$ antisymétriques pour tout échange d'indice avec :

$$\varphi_j(k_i) = \varphi_j(n_i, l_i, m_{l_i}, m_{s_i}) = \frac{R_{n_i, l_i}(r_j)}{r_j} Y_{l_i, m_{l_i}}(\theta_j, \varphi_j) \delta(\sigma_j, m_{s_i})$$

fonction d'onde monoélectronique.

$Y_{l_i, m_{l_i}}$ est une harmonique sphérique, fonction des variables angulaires θ et φ ; $\delta(\sigma_j, m_{s_i})$ est la fonction de spin.

La partie radiale $R_{n_i, l_i}(r)$ de la fonction $\varphi_j(k_i)$, dépend de la forme du potentiel $U(r)$ choisi et restera indéterminée dans la suite des calculs. Au premier ordre de la théorie des perturbations, si l'on néglige l'interaction avec les autres configurations, les niveaux d'énergie sont les valeurs propres de l'opérateur H_1 . H_1 est représenté par des matrices dépendantes de J , sur la base du couplage extrême (LS ou jj) choisi à l'avance. Les états propres seront des combinaisons linéaires de ces états de base.

Pour une configuration, le terme $\sum_{i=1}^N \left[-\frac{Ze^2}{r_i} - U(r_i) \right]$ produit une translation globale de tous ses niveaux, tandis que

l'interaction coulombienne $Q = \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}}$ et l'interaction spin-orbite

$\Lambda = \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{l}_i$ lève la dégénérescence.

Les éléments de matrice de Q et Λ sont calculés à l'aide de la méthode des opérateurs tensoriels de G. RACAH [24].

Chacun de ces opérateurs, $Q = e^2 \sum_{i>j=1}^N \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r_{ij}^k}{r_{ij}^{k+1}} (C_{\underline{m}i}^{(k)} \cdot C_{\underline{m}j}^{(k)})$ et

$\Lambda = \sum_{i=1}^N \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{x}_i$, est représenté par une partie angulaire (α_{ij}^{Jk})

calculée rigoureusement à l'aide du programme AGENAC. La partie radiale, dépendante du potentiel $U(r)$ qui reste inconnu, est traitée sous la forme de paramètres P_k ajustables aux énergies expérimentales.

Calcul des éléments de matrice de l'interaction électrostatique Q .

La partie radiale de Q est représentée par les intégrales de Slater ;

$$R^k(nl, n'l', n''l'' n'''l''') = e^2 \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r_{12}^k}{r_{12}^{k+1}} R_{nl}^*(1) R_{n'l'}^*(2) R_{n''l''}(1) R_{n'''l'''}(2) dr_1 dr_2$$

définies dans [12], interviennent sous deux formes dans une configuration : les intégrales directes, $R^k(l l', l l')$ notées $F^k(l l')$, et les intégrales d'échange, $R^k(l l', l' l)$ notées $G^k(l l')$.

Le produit scalaire des deux opérateurs tensoriels $C_{\underline{m}i}^{(k)}$ et $C_{\underline{m}j}^{(k)}$, est proportionnel à un opérateur tensoriel $X_0^{(0)}$ dont les propriétés sont données par B.R. JUDD et tel que :

$$X_0^{(0)} = \{C_{\underline{m}i}^{(k)} \cdot C_{\underline{m}j}^{(k)}\}^{(0)} = (-1)^k [k]^{-1} (C_i^{(k)} \cdot C_j^{(k)})$$

avec $[k] = 2k + 1$.

Par application du théorème de Wigner-Eckart et des découplages successifs, l'élément de matrice réduit $\langle \alpha(nl)_i SLJ || C_i^{(k)} \cdot C_j^{(k)} || \alpha'(n'l')_j S'L'J' \rangle$ se ramène, à des facteurs et symboles 3n-j près, aux formes suivantes :

$$\langle l || C^{(k)} || l \rangle \langle l' || C^{(k)} || l' \rangle \text{ pour les intégrales directes } F^{(k)}(ll')$$

et $\langle l || C^{(k)} || l' \rangle^2$ pour les intégrales d'échange $G^{(k)}(ll')$.

L'élément de matrice réduit $\langle l || C^{(k)} || l' \rangle$ est égal à :

$$(-1)^l \{ [l][l'] \}^{1/2} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Les conditions de non nullité des symboles $3j$, limitent les valeurs de k des intégrales de Slater, à celles qui vérifient les deux relations suivantes :

- l, k, l' sont triangulaires c.a.d $|l-l'| \leq k \leq l+l'$
- $l+k+l'$ est pair.

U. FANO, F. PRATS et Z. GOLDSCHMIDT [26] ont exprimé les éléments de matrice de l'interaction électrostatique à deux électrons entre les états d'une configuration électronique, sous la forme générale du produit de deux éléments de matrices réduits et d'un coefficient de recouplage :

$$\begin{aligned} & (\alpha_1 j_1, \dots, \alpha_s j_s, \dots, \alpha_t j_t, \dots; J M_J | (C_s^{(k)} C_t^{(k)}) | \alpha_1 j_1, \dots, \alpha'_s j'_s, \dots, \alpha'_t j'_t, \dots; J' M'_J) \\ & = \delta(J J') \delta(M_J M'_J) (-1)^k \{ [j_s][j'_s] \}^{-1/2} \langle \alpha_s j_s || C^{(k)} || \alpha'_s j'_s \rangle \langle \alpha_t j_t || C^{(k)} || \alpha'_t j'_t \rangle \\ & \times (j_1, \dots, (j_s^k) j_s, \dots, j_t, \dots | j_1, \dots, j'_s, \dots, (j_t^k) j'_t, \dots)^{(J)} \end{aligned}$$

La méthode exposée par A.P. JUCYS, I.B. LEVINSON et V.V. VANAGAS [27] permet d'exprimer ce coefficient de recouplage sous forme d'un graphe au facteur

$$(-1)^{2[J+\sum b_i+S]} \prod_{i=1}^{n-2} [a_i][b_i] \quad \text{près}.$$

a_i représente un moment angulaire résultant du recouplage de deux moments angulaires dans le "bra".

b_i représente un moment angulaire résultant du recouplage de deux moments angulaires dans le "ket".

S est la somme de tous les moments angulaires premiers dans les recouplages du "bra" et du "ket" et n le nombre de moments angulaires élémentaires.

Le graphe qui est fermé et possède $3(n-1)$ branches et $2(n-1)$ noeuds, constitue un symbole $N-j$ (N égal au nombre de branches).

Les moments angulaires sont représentés graphiquement par des branches orientées (du "bra" vers le "ket", dans la convention que nous avons prise). Le changement de sens sur une branche j introduit un facteur de phase :

$$\overrightarrow{j} = (-1)^{2j} \overleftarrow{j}$$

Le couplage de deux moments angulaires noté $(j_1 j_2) j_{12}$ est représenté graphiquement par :

$$\begin{array}{c} j_1 \\ \diagdown \\ + \\ \diagup \\ j_2 \end{array} \quad \equiv \quad \begin{array}{c} j_2 \\ \diagdown \\ - \\ \diagup \\ j_1 \end{array} \quad \equiv \quad (-1)^{j_1+j_2+j_{12}} \begin{array}{c} j_1 \\ \diagdown \\ - \\ \diagup \\ j_2 \end{array}$$

Le symbole $N-j$ peut se réduire à un produit de symboles irréductibles $3n-j$ ($3n < N$), en respectant certaines règles de coupure des lignes du graphe. Les règles de coupure et de réduction des graphes, les plus fréquemment rencontrées dans les calculs que nous avons effectués, sont rassemblées ci-dessous. Les symboles $\boxed{\alpha}$ et $\boxed{\beta}$ représentent les sous-graphes obtenus, après coupure.

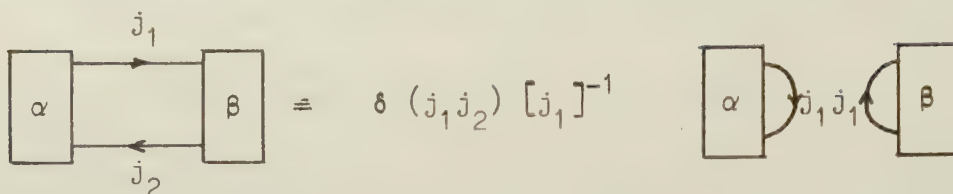
Suppression d'une branche nulle (B0) :

$$\begin{array}{c} j_1 \quad j_2 \\ \rightarrow \quad \rightarrow \\ \boxed{\alpha} \quad \boxed{\beta} \\ j'_{12} = 0 \\ \leftarrow \quad \leftarrow \\ j'_1 \quad j'_2 \end{array} \equiv \delta(j_1 j_2) [j_1]^{-\frac{1}{2}} \delta(j'_1 j'_2) [j'_1]^{-\frac{1}{2}} \begin{array}{c} j_1 \\ \rightarrow \\ \boxed{\alpha} \quad \boxed{\beta} \\ \leftarrow \\ j'_1 \end{array}$$

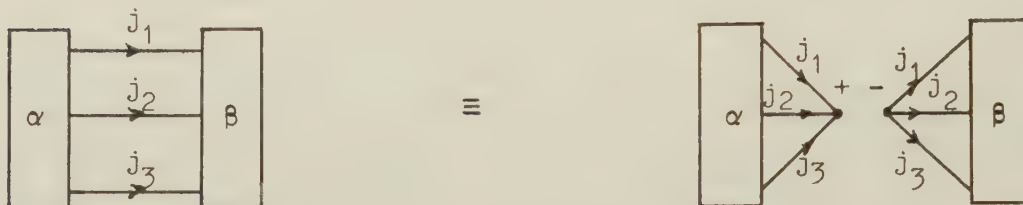
Réduction d'une branche double (B2) :

$$\begin{array}{c} j'_{12} \\ \rightarrow \\ \boxed{\alpha} \quad \boxed{\beta} \\ j_{12} \end{array} \equiv \delta(j_{12} j'_{12}) [j_{12}]^{-1} \begin{array}{c} \boxed{\alpha} \\ \rightarrow \quad \leftarrow \\ j_{12} \end{array}$$

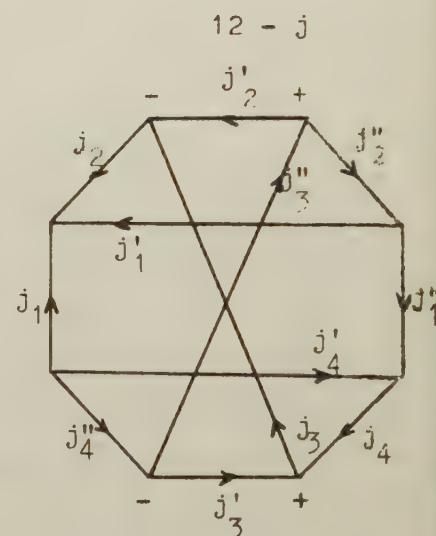
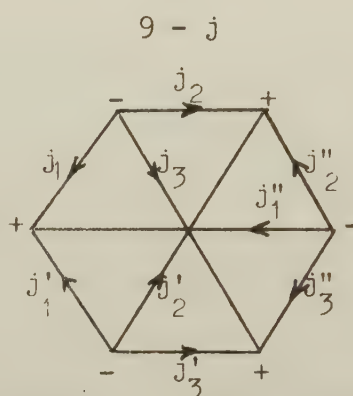
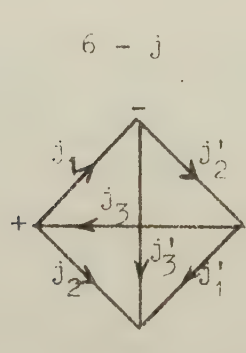
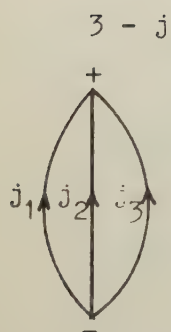
Coupure suivant deux lignes (C2) :



Coupure suivant trois lignes (C3) :



Quelques $3n - j$ irréductibles :



$j_1 j_2 j_3$ sont soumis
à une condition
triangulaire

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j'_1 & j'_2 & j'_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j'_1 & j'_2 & j'_3 \\ j''_1 & j''_2 & j''_3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 & j_4 \\ j'_1 & j'_2 & j'_3 & j'_4 \\ j''_1 & j''_2 & j''_3 & j''_4 \end{pmatrix}$$

Il est bien entendu hors de sujet de rappeler, ici, l'ensemble des règles et l'intérêt de cette méthode graphique. Elle est d'un usage très simple pour trouver la composition en produit de $3n-j$ de base des formules littérales (α_{ij}^{jk}) dont les temps de calcul sont les plus performants à l'aide du programme AGENAC. Devant l'importance des développements de cette méthode graphique en spectroscopie atomique, Y. BORDARIER [28] a écrit récemment le programme "SUPRAC" qui permet en partant de l'écriture du "bra", de l'opérateur et du "ket", de trouver les formules littérales des coefficients de matrice (α_{ij}^{jk}) .

Calcul des éléments de matrice de l'interaction spin-orbite Λ .

La partie radiale de Λ , agissant sur les fonctions d'onde $\varphi_j(k_i)$, sera représentée par des intégrales de structure fine

$$\zeta_{nl} = \int_0^\infty R_{nl}^*(r) \xi(r) R_{nl} dr$$

dépendantes du potentiel $U(r)$ et, par conséquent, traitées comme des paramètres ajustables P_k . Il y aura autant d'intégrales ζ_{nl} que d'électrons des couches ouvertes de l différent de zéro.

La partie $\vec{s}_i \cdot \vec{l}_i$ de l'opérateur Λ est un cas particulier des opérateurs tensoriels doubles $\underline{w}^{(nk)}$ de rangs $n = 1$ et $k = 1$ qui agissent sur l'espace de spin et d'orbite.

L'élément de matrice réduit de $\underline{w}^{(11)}$ entre deux fonctions monoélectroniques est :

$$\langle s l \parallel \underline{w}^{(11)} \parallel s' l' \rangle = 3 \delta(ss') \delta(ll')$$

On peut montrer que :

$$\begin{aligned} < \alpha SLJM_J | \xi(r_i) \vec{s}_i \cdot \vec{l}_i | \alpha' S' L' J' M_{J'} > = \delta(JJ') \delta(M_J M_{J'}) \\ & \times (-1)^{S'+L+J} \left[\frac{l(l+1)(2l+1)}{6} \right]^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} S & S' & 1 \\ L' & L & J \end{matrix} \right\} < \alpha SL || w_i^{(11)} || \alpha' S' L' > \zeta_{n_i l_i} \end{aligned}$$

et que des découplages successifs permettront de réduire les "bra" et "ket" de l'élément de matrice réduit à la partie monoélectronique (s_i, l_i) intéressée.

En résumé, les formules qui représentent la partie angulaire des opérateurs d'interaction coulombienne Q et spin-orbite Λ écrites sous la forme littérale d'un produit de symboles élémentaires $3j$, $6-j$ et $9-j$, sont calculées à l'aide du programme AGENAC [29].

Les coefficients (α_{ij}^{Jk}) obtenus sont assemblés en matrices dépendantes de J par le programme ASSAC [30] et stockés sur une bande magnétique. Nous tenons à remercier ici le groupe du Département de Physique de l'Université Hébraïque de Jérusalem, qui a communiqué très aimablement aux membres du laboratoire le contenu de sa bande bibliothèque de configurations calculées. Cette coopération a évité de refaire les calculs des configurations déjà construites.

Il reste maintenant à définir les valeurs initiales des paramètres R^k et des constantes ζ_{nl} de structure fine. On comprend aisément que, de ce choix initial, dépendra la qualité de l'interprétation des niveaux d'énergie quand ceux-ci seront denses.

3 - Choix des valeurs initiales des paramètres.

Deux méthodes sont employées : l'une est empirique, l'autre est absolue. La première est fondée sur les valeurs des intégrales, déterminées par l'étude paramétrique des éléments voisins. Elle ressemble à la méthode graphique, utilisée pour localiser la position des configurations électroniques. La deuxième, utilise les solutions $\psi^{(K)}$ du type champ central qui satisfont le principe variationnel. Les fonctions monoélectroniques $\psi^{(K)}$ sont déterminées à l'aide du programme Hartree-Fock SCF de C. FROESE-FISCHER [31]. Les paramètres internes des configurations (intégrales F_k , G_k et ζ_{nl}), sont bien connus pour les terres rares et la méthode graphique en fixe les valeurs avec une incertitude moyenne de 20%.

Les intégrales $R^k(l'l'', l''l''')$, qui interviennent seulement dans les interactions de configurations proches, sont très mal connues paramétriquement. La méthode Hartree-Fock en fournira une bonne approximation en valeur absolue et en signe; signe qui reste indéterminé dans un processus d'optimisation des paramètres par moindre carré sur les énergies.

Toutes les intégrales d'interaction entre les configurations profondes des spectres de Tm I et II sont calculées. Nous tenons à remercier M. FRED de ses conseils pour l'emploi du programme HF SCF [32] et de sa bienveillance pour l'utilisation de la CDC 3600 d'Argonne.

Les résultats sont présentés dans les tableaux 3, 4, 5, et 6 sous la forme suivante :

La partie supérieure des cases non diagonales donne la partie commune électronique des deux configurations des cases diagonales correspondantes, additionnée des paires d'électrons $(ll' \times l''l''')$ dont elles diffèrent. La partie inférieure des cases non-diagonales rassemble les valeurs des intégrales $R^k(ll', l''l''')$ pour toutes les valeurs k possibles, en respectant les règles triangulaires imposées par la non-nullité du produit de symboles

$$3j : \begin{pmatrix} l & k & l'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & k & l''' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

TABLEAU 3 - Tm I : configurations impaires

$f^{13}s^2$	$f^{12}s + (fs \times fd)$	$f^{11}s + (f^2 \times fp)$	$f^{12}s + (fs \times dp)$	$f^{13} + (s^2 \times p^2)$	$f^{13} + (s^2 \times d^2)$
	$R^2(fs, fd) = -112 (,02)$ $R^3(fs, df) = 1173 (,47)$	$R^2(f^2, fp) = -1655 (,13)$ $R^4(f^2, fp) = -662 (,08)$	$R^1(fs, dp) = -6115 (,81)$ $R^2(fs, pd) = -702 (,36)$	$R^1(s^2, p^2) = 24585 (,99)$	$R^2(s^2, d^2) = 18053 (,95)$
	$f^{13}ds$	$f^{12}s + (fd \times sp)$	$f^{12}s + (fd \times dp)$ ----- $f^{11}ds + (f^2 \times fp)$	$f^{13} + (ds \times p^2)$	$f^{13} + (ds \times d^2)$ ----- $f^{12}d + (fs \times fd)$
		$R^3(fd, sp) = -1391 (,71)$ $R^2(fd, ps) = -959 (,36)$	$R^1(fd, dp) = 4091 (,50)$ $R^3(fd, dp) = 906 (,31)$ $R^2(fd, pd) = -806 (,23)$ $R^4(fd, pd) = -321 (,16)$ ----- $R^2(f^2, fp) = -1410 (,13)$ $R^4(f^2, fp) = -559 (,09)$	$R^1(ds, p^2) = -19620 (,93)$	$R^2(ds, d^2) = -17602 (,93)$ ----- $R^2(fs, fd) = -289 (,05)$ $R^3(fs, df) = 953 (,47)$
		$f^{12}s^2p$	$f^{12}s + (sp \times dp)$ ----- $f^{11}sp + (fs \times fd)$	$f^{12}p + (s^2 \times fp)$	0
			$R^2(sp, dp) = -13837 (,95)$ $R^1(sp, pd) = -14451 (,85)$ ----- $R^2(fs, fd) = 1599 (,16)$ $R^3(fs, df) = 2182 (,53)$	0	
			$f^{12}dsp$	$f^{12}p + (ds \times fp)$	$f^{12}d + (sp \times fd)$
				$R^1(ds, fp) = -6031 (,80)$ $R^3(ds, pf) = -1024 (,67)$	$R^3(sp, fd) = -1075 (,73)$ $R^2(sp, df) = -741 (,38)$
				$f^{13}p^2$	$f^{13} + (p^2 \times d^2)$
					$R^1(p^2, d^2) = 17877 (,90)$ $R^3(p^2, d^2) = 11185 (,97)$
					$f^{13}d^2$

TABLEAU 4 - Tm I : configurations paires

$f^{12}ds^2$	$f^{12}s + (ds \times fp)$	$f^{12}s + (ds \times d^2)$ ----- $f^{11}ds + (fs \times fd)$	$f^{12}d + (s^2 \times fp)$	$f^{12}s + (ds \times sp)$
	$R^1(ds, fp) = -5668 (,81)$ $R^3(ds, pf) = -946 (,67)$	$R^2(ds, d^2) = -18296 (,82)$ ----- $R^2(fs, fp) = 940 (,12)$ $R^3(fs, df) = 1724 (,53)$	0	0
	$f^{13}sp$	$f^{12}s + (fp \times d^2)$	$f^{13} + (sp \times dp)$ ----- $f^{12}p + (fs \times fd)$	$f^{12}s + (fp \times p^2)$ ----- $f^{11}sp + (f^2 \times fp)$
		$R^1(fp, d^2) = 2458 (,36)$ $R^3(fp, d^2) = 345 (,13)$	$R^2(sp, dp) = -13844 (,97)$ $R^1(sp, pd) = -15123 (,92)$ ----- $R^2(fs, fd) = 171 (,02)$ $R^3(fs, df) = 1394 (,48)$	$R^2(fp, p^2) = 391 (,28)$ ----- $R^2(f^2, fp) = -1661 (,12)$ $R^4(f^2, fp) = -667 (,08)$
		$f^{12}d^2s$	$f^{12}d + (ds \times fp)$	$f^{12}s + (d^2 \times p^2)$
			$R^1(ds, fp) = -4575 (,82)$ $R^3(ds, pf) = -758 (,70)$	$R^1(d^2, p^2) = 14315 (,79)$ $R^3(d^2, p^2) = 9763 (,93)$
			$f^{13}dp$	$f^{12}p + (fd \times sp)$
				$R^3(fd, sp) = -1504 (,70)$ $R^2(fd, ps) = -1047 (,36)$
				$f^{12}sp^2$

TABLEAU 5 - Tm II : configurations impaires

f^{13}_s	$f^{12} + (fs \times fd)$	$f^{11}_s + (f^2 \times fp)$	$f^{12} + (fs \times dp)$
	$R^2(fs, fd) = 429 (,05)$ $R^3(fs, df) = 1631 (,48)$	$R^2(f^2, fp) = -1902 (,12)$ $R^4(f^2, fp) = -765 (,08)$	$R^1(fs, dp) = -7600 (,80)$ $R^2(fs, pd) = -971 (,35)$
f^{13}_d	$f^{12} + (fd \times sp)$	$f^{12} + (fd \times dp)$ ----- $f^{11}_d + (f^2 \times fp)$	
	$R^3(fd, sp) = -1816 (,69)$ $R^2(fd, ps) = -1261 (,36)$	$R^1(fd, dp) = 4479 (,44)$ $R^3(fd, dp) = 1038 (,26)$ $R^2(fd, pd) = -1232 (,24)$ $R^4(fd, pd) = -529 (,19)$ ----- $R^2(f^2, fp) = -1710 (,13)$ $R^4(f^2, fp) = -683 (,08)$	
f^{12}_{sp}	$f^{12} + (sp \times dp)$ ----- $f^{11}_p + (fs \times fd)$	f^{12}_{dp}	
	$R^2(sp, dp) = -16143 (,93)$ $R^1(sp, pd) = -16541 (,81)$ ----- $R^2(fs, fd) = 2108 (,19)$ $R^3(fs, df) = 2527 (,53)$		

TABLEAU 6 - Tm II : Configurations paires

f^{12}_s	$f^{11}_{s+} (fs \times fd)$	$f^{12} + (s^2 \times fp)$	$f^{12} + (s^2 \times d^2)$
	$R^2(fs, fd) = 1905 (,17)$ $R^3(fs, df) = 2393 (,53)$	0	$R^2(s^2, d^2) = 19127 (,88)$
	f^{12}_{ds}	$f^{12} + (ds \times fp)$	$f^{12} + (ds \times d^2)$ ----- $f^{11}_{d+} (fs \times fd)$
		$R^1(ds, fp) = -7103 (,79)$ $R^3(ds, pf) = -1302 (,66)$	$R^2(ds, d^2) = -19536 (,79)$ ----- $R^2(fs, fd) = 1453 (,15)$ $R^3(fs, df) = 2108 (,53)$
		f^{13}_p	$f^{12} + (fp \times d^2)$ $R^1(fp, d^2) = 2763 (,32)$ $R^3(fp, d^2) = 367 (,10)$
			f^{12}_d

Le facteur d'annulation (ou "cancellation factor") entre parenthèses est défini dans [32]. Il chiffre la sensibilité de la valeur des intégrales aux fluctuations des fonctions d'onde radiales HF.

Une fois les valeurs initiales des paramètres P_K choisies, les matrices J de la configuration sont diagonalisées à l'aide du programme DIAGAC [34], pour trouver les valeurs propres E_n^J et les vecteurs propres V_n^J exprimés comme les combinaisons linéaires $\sum_i V_{in}^J$ des vecteurs de base LS.

Les dérivées premières des énergies par rapport aux paramètres P_K , données par la relation :

$$\frac{\delta E_n^J}{\delta P_K} = \sum_{ij} V_{in} V_{jn} (\alpha_{ij}^{Jk}) \text{ sont calculées. Elles serviront dans le}$$

programme GRAMAC [35], à ajuster les valeurs des paramètres, en minimisant les écarts entre les énergies calculées et observées des niveaux identifiés.

A partir des premiers niveaux observés d'une configuration et après une ou deux itérations successives, on peut généralement prévoir les énergies des niveaux inconnus avec une incertitude inférieure à 200 cm^{-1} . Les valeurs propres et les facteurs de Landé g , calculés en couplage intermédiaire, permettent d'orienter la recherche des niveaux manquants dans la meilleure des voies.

C'est l'utilisation simultanée de la méthode empirique de calcul des niveaux d'énergie et du dépouillement des spectrogrammes Zeeman, qui nous a permis de contribuer efficacement à la classification et à l'interprétation des spectres de Tm I et II.

CHAPITRE II

CLASSIFICATION DU SPECTRE D'ARC DE Tm

Les principales études du spectre du thulium sont dûes à W.F. MEGGERS [36] qui a déterminé le multiplet fondamental 2F de $f^{13}6s^2$ et classé 62 raies. R. VETTER [14], par l'étude des structures hyperfines des raies, a mesuré les écarts hyperfins et donné les valeurs de J de 17 niveaux pairs et 10 niveaux impairs.

II - 1 - DONNEES EXPERIMENTALES NOUVELLES

En 1964, outre les 537 raies observées dans le domaine infrarouge 0,8 - 2,5 μ , avec un SISAM de faible résolution, J. VERGES [13] a mesuré les structures Zeeman de 55 raies intenses avec un SISAM de grande résolution. A la même époque, M. FRED et F.S. TOMKINS ont mis à notre disposition les spectrogrammes Zeeman photographiés à Argonne National Laboratory avec le spectrographe Paschen-Runge de 9,15 m de focale.

Trois séries de plaques photographiques (20039, 20044 et 20042) ont été prises avec les réseaux G_2 et G_4 (respectivement 600 et 300 traits/mm) et des filtres différents. Elles couvrent respectivement les domaines 2750 - 4500 $\text{\AA}$, 4050 - 7000 $\text{\AA}$ et 6500 - 9000 $\text{\AA}$. Les courbes de dispersion des réseaux, suivant les différents ordres, sont représentées en $\text{\AA}$ et en U.L (unité Lorentz) sur les figures 6 et 7. Si deux raies sont séparées sur la pla-

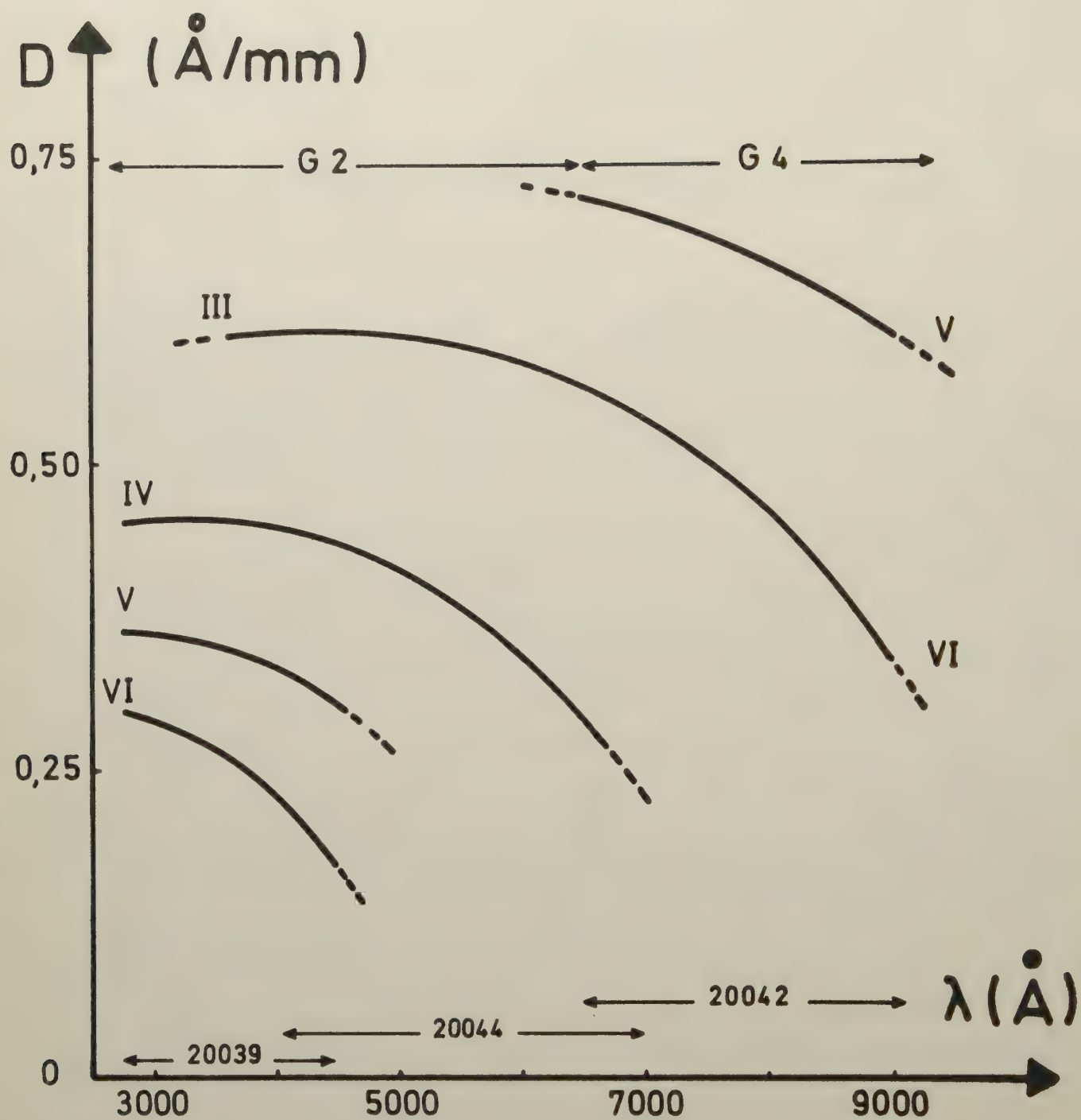


fig. 6

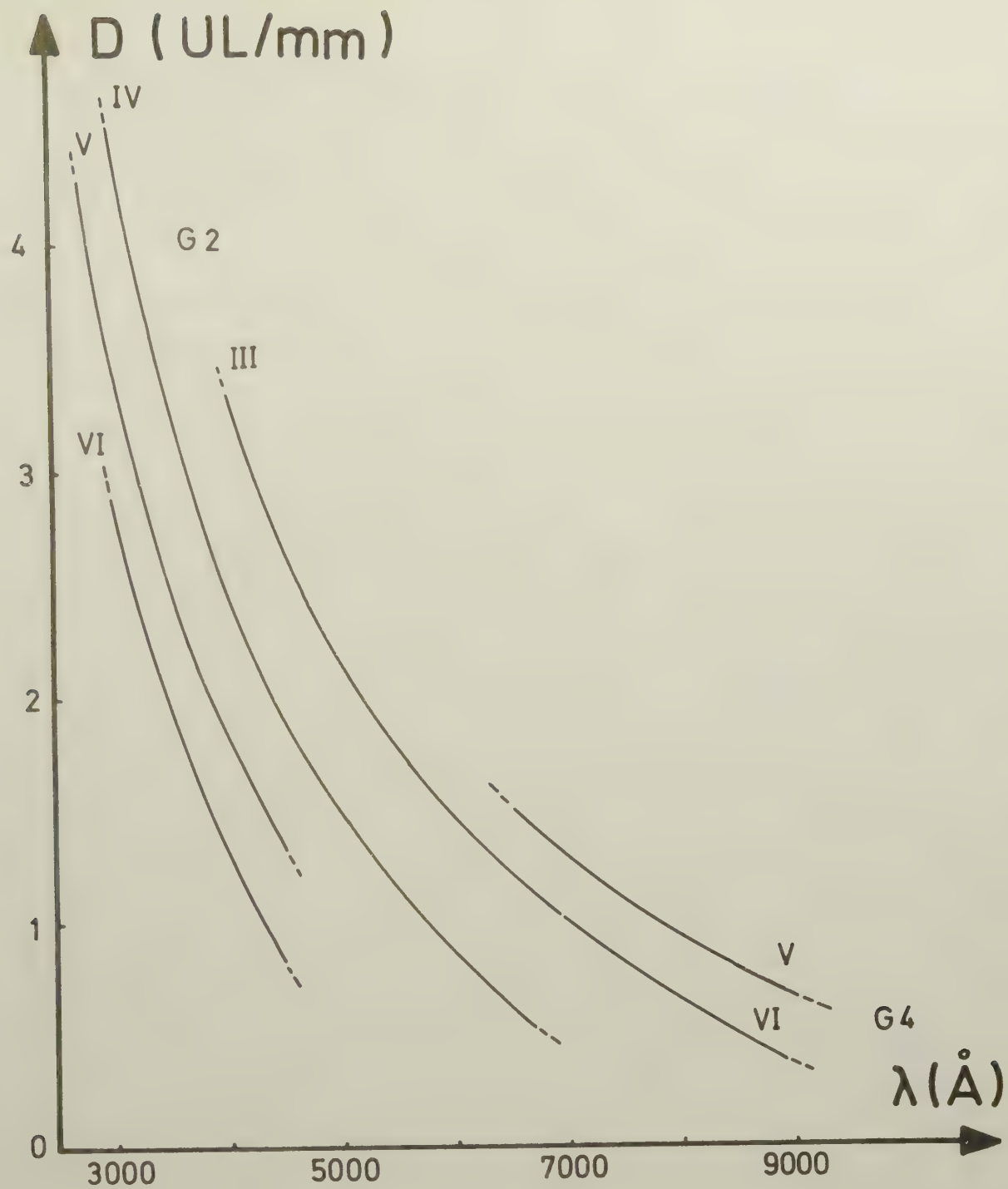


fig. 7

que quand leur distance est supérieure à 0,1 mm ; il existe, en moyenne de 4000 à 9000 $\overset{\circ}{\text{\AA}}$, une valeur Δg de 0,10 en dessous de laquelle les composantes Zeeman ne sont pas résolues. En raison de l'élargissement des raies dû à la structure hyperfine, nous estimons l'incertitude moyenne sur la détermination des facteurs de Landé, à $\pm 0,01$.

Les mesures ont été faites à l'aide d'une loupe micrométrique de grossissement égal à 7, graduée au 1/10 $\text{\AA}$ de mm. Plus de 700 structures Zeeman ont été observées. Ces premiers résultats nous ont permis, en collaboration avec J. BLAISE, de réviser la classification existante des spectres d'arc et d'étincelle et de mettre en évidence de nouveaux niveaux [37]. En octobre 1966, W.F. MEGGERS et J. SUGAR du National Bureau of Standards nous ont communiqué les listes séparées des longueurs d'onde des spectres de Tm I et II, mesurées avec un comparateur semi-automatique. Depuis cette date, c'est en collaboration avec J. SUGAR que la classification des spectres de Tm I et II est poursuivie.

Les calculs théoriques et l'interprétation des niveaux sont effectués au laboratoire Aimé Cotton et les niveaux prévus par les calculs sont recherchés systématiquement au N.B.S. à l'aide du programme de différence "COMBO". Ce programme, conçu initialement par G. RACAH pour IBM 7094, a été retranscrit en FORTRAN V par J.L. TECH pour l'ordinateur UNIVAC 1108 et transmis très aimablement au laboratoire en 1968. Une version, adaptée à la configuration de l'ordinateur UNIVAC 1108 de la Faculté des Sciences à Orsay, fonctionne actuellement sous le nom de "COMBAC".

II - 2 - DIAGRAMME D'ENERGIE DES CONFIGURATIONS IDENTIFIEES

A partir du multiplet fondamental 2F de $f^{13}s^2$, établi par W.F. MEGGERS, nous avons confirmé à l'aide de l'effet Zeeman, l'identification des configurations $f^{13}6s7s$ et $f^{13}6s6p$ établies par R. VETTER [38] et calculées par Y. BORDARIER. Avec la liste infrarouge, mesurée par J. VERGES [13], nous avons construit et identifié les configurations impaires profondes $f^{13}ds$ et $f^{12}s^2p$.

L'identification des termes de la configuration $f^{12}s^2p$, notés en couplage $((f^{12})S_1L_1J_1, (p)j_2)$ ($^3H_6 1/2$) et ($^3H_6 3/2$), nous a permis de mettre en évidence les niveaux profonds de $f^{12}ds^2$. Le multiplet ($^3H_6 3/2$) de $f^{12}ds^2$ constitue la base du système B. Les configurations impaires $f^{13}6s8s$, $f^{12}5d6s6p$, $f^{13}6s6d$ et $f^{13}6p^2$ sont maintenant connues et identifiées.

L'interprétation de la configuration $f^{13}dp$, effectuée par J. SUGAR, est confirmée par des niveaux très élevés dont les transitions avec le niveau fondamental $^2F_{7/2}$, sont observées en absorption. Tous les niveaux profonds observés de ces configurations sont rassemblés dans le tableau 7.

Le schéma d'énergie des configurations est représenté sur la figure 8. Les transitions situées dans le domaine infrarouge sont indiquées en trait gras et les flèches rappellent le sens de la progression suivie au cours de la classification du spectre. Le signe + entre les configurations profondes indique un mélange configurationnel assez grand pour expliquer les transitions infrarouges observées entre $f^{12}ds^2$ et $f^{13}ds$ d'une part et $f^{13}sp$ et $f^{12}s^2p$ d'autre part. Ces transitions, qui correspondent au saut électronique $6s - 4f$ ($\Delta l = 3$), sont rigoureusement interdites dans un modèle purement mono-configurationnel. La configuration $f^{12}d^2s$, localisée vers 25000 cm^{-1} à l'aide des courbes graphiques, demeure inconnue. Les transitions intenses avec $f^{12}dsp$ sont en partie situées dans l'infrarouge plus lointain et nous espérons, une fois en possession du domaine de longueurs d'onde exploré par la spectrométrie de Fourier, mettre en évidence $f^{12}d^2s$.

TABLEAU 7 - Niveaux profonds des configurations électroniques de Tm I

Configurations					
Impaires			Paires		
Nom	Niveau (cm ⁻¹)	J	Nom	Niveau (cm ⁻¹)	J
4f ¹³ 6s ²	0	7/2	4f ¹² 5d6s ²	13119,62	9/2
4f ¹³ 5d6s	20406,87	5/2	4f ¹³ 6s6p	16742,24	7/2
4f ¹² 6s ² 6p	22468,04	11/2	4f ¹³ 5d6p	38318,65	3/2
4f ¹² 5d6s6p	29308,70	9/2			
4f ¹³ 6s7s	32217,21	9/2			
4f ¹³ 6s6d	38861,95	5/2			
4f ¹³ 6s8s	41078,54	9/2			
4f ¹³ 6p ²	41841,61	7/2			

Finalement quelques 2600 raies de la liste de J. SUGAR ont été classées (*).

(*) Cette liste peut être demandé au Laboratoire Aimé Cotton; elle sera publiée ultérieurement au Journal de Recherche du NBS en collaboration avec J. SUGAR.

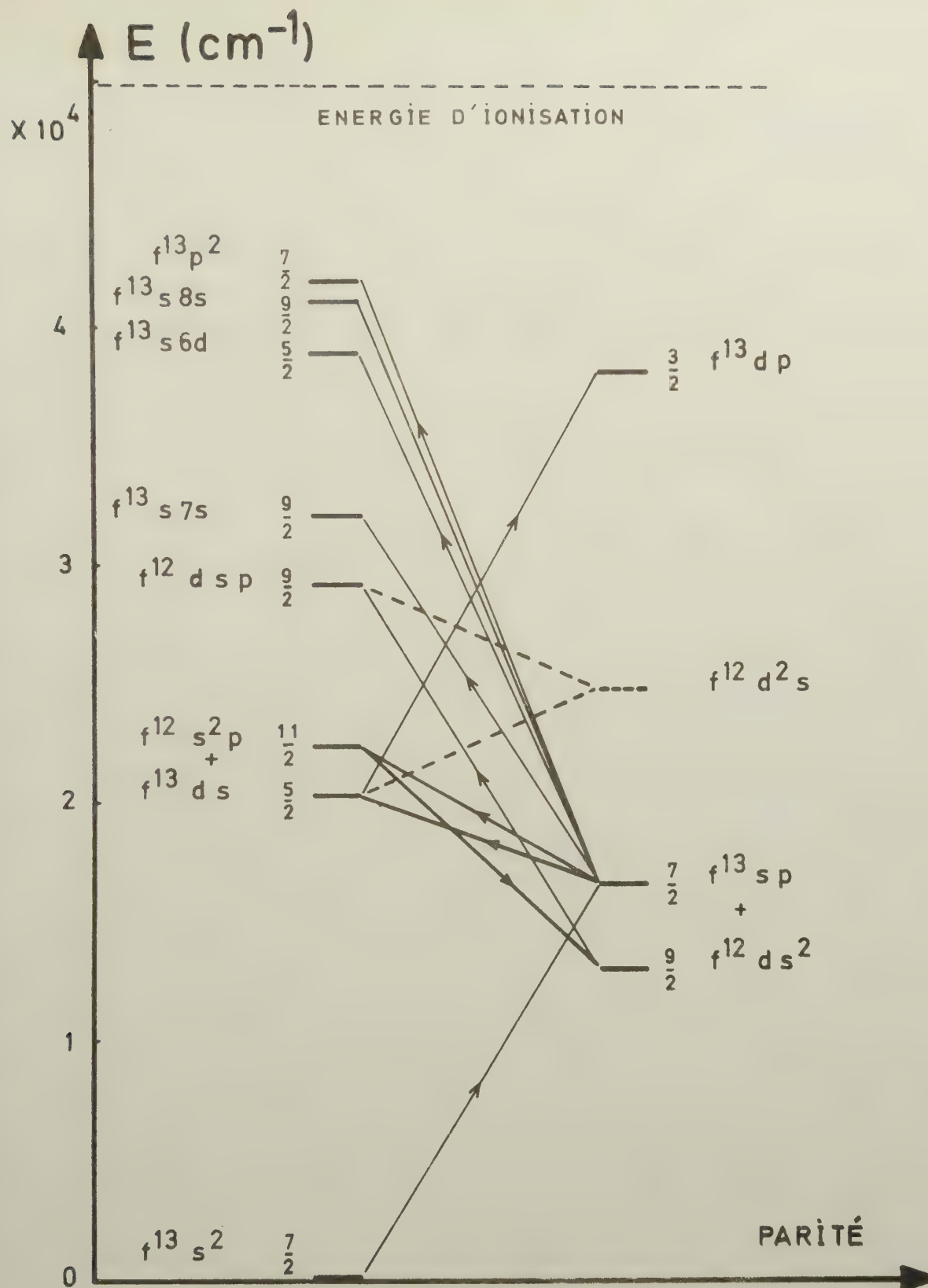


fig. 8

- Position des configurations de Tm I -

II - 3 - CONFIGURATIONS PAIRES

$$1 - 4f^{12}5d6s^2 + 4f^{13}6s6p .$$

Les coefficients des matrices de $f^{13}sp$ ont été calculés à Jérusalem, et ceux de $f^{12}ds^2$ au laboratoire en utilisant les formules de Q et A données par B.R. JUDD [39] pour les configurations $l^n l'$. L'interaction de configuration entre $f^{13}6s6p$ et $f^{12}5d6s^2$ fait intervenir deux intégrales de Slater, $R^1(ds,fp)$ et $R^3(ds,pf)$; les parties angulaires de ces paramètres sont exprimées par les formules (4) et (5) de l'annexe à partir des couplages de base suivants :

$$\begin{aligned} & (((f^n) \quad S_1 L_1, s) \quad S_2 L_2, p) SLJ) \quad \text{pour } f^n sp \\ \text{et} \quad & (((f^{n-1}) \quad \bar{S} L, d) \quad S' L', s^2) S' L' J') \quad \text{pour } f^{n-1} ds^2 . \end{aligned}$$

Nous avons publié [40] en 1966 l'étude paramétrique de ces deux configurations. Depuis cette date, 11 niveaux des multiplets profonds de $f^{12}ds^2$, ont été trouvés [13] et nous avons procédé à une nouvelle optimisation des paramètres, à partir de 80 niveaux au lieu de 68. Les valeurs des paramètres pour la dernière diagonalisation sont données dans la table 1. Les écarts-types sont ceux des équations du moindre-carré précédant la dernière diagonalisation. Ils mesurent la dépendance des valeurs des paramètres en fonction des écarts ΔE entre les énergies calculées et observées des niveaux identifiés.

Le signe des intégrales $R^k(ds,fp)$ est celui des intégrales HF calculées au chapitre I. Ce signe reste indéterminé par optimisation des paramètres d'interaction sur les niveaux observés. En effet, au second ordre de la théorie des perturbations, deux termes $(\alpha_1 SL)$ et $(\alpha_2 SL)$, qui interagissent, ont une répulsion commune Δ donnée par l'expression suivante :

$$\Delta = \frac{(< \alpha_1 SL | Q_{int.} | \alpha_2 SL >)^2}{\Delta E}$$

où ΔE est la différence d'énergie entre les deux termes.

TABLE 1 - Paramètres de $4f^{12}5d6s^2 + 4f^{13}6s6p$.

Paramètres	Valeurs (cm^{-1})	Ecart-types (cm^{-1})
T	29856	69
$\Delta (f^{13}\text{sp} - f^{12}\text{ds}^2)$	- 3963	97
$E^1(f^{12})$	6866	128
$E^2(f^{12})$	33,1	0,8
$E^3(f^{12})$	681,5	8
$F_2(\text{fd})$	145	3
$F_4(\text{fd})$	12,4	0,7
$G_1(\text{fd})$	116	3,4
$G_3(\text{fd})$	14,4	1,4
$G_5(\text{fd})$	2,6	0,3
$F_2(\text{fp})$	48,3	4,4
$G_2(\text{fp})$	14,4	4,9
$G_4(\text{fp})$	6,7	4
$G_3(\text{fs})$	150	fixé
$G_1(\text{sp})$	3577	53
$\zeta_f(f^{13})$	2507	16
$\zeta_f(f^{12})$	2649	10
ζ_d	798	19
ζ_p	1572	49
$R^1(\text{ds}, \text{fp})$	- 2884	152
$R^3(\text{ds}, \text{pf})$	- 749	441
N = 80 $\overline{\Delta E} = 105 \text{ cm}^{-1}$		

Un changement du signe de l'élément non diagonal entre les deux niveaux, n'introduit pas de variation pour Δ . L'amplitude des composantes des deux vecteurs propres est conservée; seul le signe de chaque vecteur propre est changé.

Comme le signe des vecteurs propres intervient dans les calculs de forces de raies pour des bases multi-configurationnelles, nous choisirons de préférence pour rendre cohérent nos calculs, les signes des intégrales R^k calculées par la méthode HF SCF.

L'écart quadratique moyen $\overline{\Delta E}$ est défini par la relation suivante :

$$\overline{\Delta E} = \left[\frac{\sum (E_{\text{OBS.}} - E_{\text{CALC.}})^2}{N - p} \right]^{\frac{1}{2}}$$

avec N , le nombre de niveaux interprétés

et p , le nombre de paramètres P_k laissés libres.

Sous l'effet de l'interaction spin-orbite des électrons f , le coeur f^{13} possède deux états d'énergie, $^2F_{7/2}$ et $^2F_{5/2}$, distants de $7/2 \zeta_f$, soit en moyenne 8770 cm^{-1} pour Tm I. Les états propres du groupe $6s6p$ des électrons optiques sont décrits par les paramètres $G_1(6s6p)$ et ζ_{6p} . La valeur calculée 0,33 du paramètre χ , défini par E.U. CONDON et G.H. SHORTLEY [16] et égal à $\frac{3}{4} \zeta_{6p} / G_1(6s6p)$, montre que le couplage réel des électrons $6s6p$, est plus proche du couplage extrême LS, que du couplage $j_1 j_2$.

L'interaction des électrons $6s$ et $6p$, avec le champ électrostatique des électrons de f^{13} , reste faible devant l'énergie propre du coeur et celle de $6s6p$.

L'atome peut donc prendre, 1, 3, 5 ou 3 énergies possibles pour chaque état parent 2F de f^{13} , suivant que les électrons $6s6p$ sont dans les états $^3P_{0,1,2}$ ou 1P_1 .

Au total, pour les deux parents 2F , la configuration $f^{13}sp$ comporte 24 niveaux.

La pureté d'une configuration dans un couplage sera définie par la moyenne des plus fortes composantes de tous ses vecteurs propres. Dans le cou-

plage intermédiaire défini par $((f^{13})_{j_1}, (6s6p)[S_2L_2]J_2)$, la pureté de f^{13}_{sp} est de 75 % contre 43 %, sur la base LS choisie au départ des calculs.

La structure des multiplets en forme d' "ombrelles" a été remarquée par G. RACAH [41] comme une caractéristique de ce couplage dans les configurations f^n_{sp} .

Le couplage intermédiaire de $f^{12}_{ds^2}$ est plus difficile à approcher. Dans nos calculs de 1966, les fonctions propres de f^{12} , dans le couplage $((f^{12}) [S_1L_1] J_1, (d)j_2)$, sont pures LS. Or nous savons que l'énergie spin-orbite des électrons 4f est loin d'être négligeable pour le coeur f^{12} , et qu'il serait préférable de choisir une fonction propre J_1 du coeur réel f^{12} , pour décrire la structure des termes observés. La composition des vecteurs propres de f^{12} pour les paramètres E^1, E^2, E^3 et ζ_f de la configuration $f^{12}_{ds^2}$ est donnée dans le tableau 8. La pureté du coeur réel f^{12} sur la base LS étant seulement de 65 %, nous définirons, dorénavant, le couplage J_1j_2 à partir des fonctions propres réelles J_1 de f^{12} . Les fonctions propres du coeur réel f^{12} du tableau 8 seront désignées de la façon suivante :

* 3F_4 signifie que la fonction propre réelle J_1 égale à 4,

$[(63) \underline{^3F} + (29) \underline{^1G} - (8) \underline{^3H}] 4$, est couplée avec la valeur j_2 de l'électron 5d.

La pureté de $f^{12}_{ds^2}$ dans ces couplages J_1j_2 , coeur f^{12}_{LS} et coeur réel f^{12} , est donnée ci-après :

TABLEAU 8 - Coeur f^{12} réel de la configuration $f^{12}ds^2$.

<u>Energie</u>	<u>J</u>	<u>Compositions des états sur la base LS</u>
0	6	(99.10) $\underline{^3H_6}$ + (0.90) 1I_6
5602	4	(63.38) $\underline{^3F_4}$ + (28.74) 1G_4 - (7.88) 3H_4
8196	5	(100) 3H_5
12523	4	(60.05) $\underline{^3H_4}$ + (26.79) 3F_4 - (13.16) 1G_4
14253	3	(100) 3F_3
14853	2	(77.35) $\underline{^3F_2}$ - (20.85) 1D_2 - (1.80) 3P_2
21234	4	(58.10) $\underline{^1G_4}$ + (32.07) 3H_4 - (9.83) 3F_4
27914	2	(42.95) $\underline{^1D_2}$ + (38.17) 3P_2 + (18.88) 3F_2
34193	6	(99.10) $\underline{^1I_6}$ - (0.90) 3H_6
35698	0	(95.05) $\underline{^3P_0}$ - (4.95) 1S_0
36462	1	(100) 3P_1
38164	2	(60.03) $\underline{^3P_2}$ - (36.20) 1D_2 - (3.77) 3F_2
77694	0	(95.05) $\underline{^1S_0}$ + (4.95) 3P_0

Couplage : LS

 $J_1 j_2$ $*J_1 j_2$ coeur f^{12} LScoeur f^{12} réel

$$(((f^{12}) S_1 L_1, d) SLJ) (((f^{12}) [S_1 L_1] J_1, (d) j_2) J) (((f^{12}) * [S_1 L_1] J_1, (d) j_2) J)$$

Pureté : 49 %

56 %

70 %

Le tableau 9 rassemble les résultats obtenus. Les énergies calculées (E CALC.) et observées (E OBS.), les écarts ΔE (E OBS. - E CALC.) ainsi que les facteurs de Landé g observés et calculés, sont indiqués. La composition des fonctions propres, dans les couplages intermédiaires définis précédemment, est donnée pour chaque niveau par :

- les deux plus fortes composantes dans l'hypothèse du coeur f^{12} LS.
- la plus forte composante pour le coeur f^{12} réel.

Le pourcentage d'appartenance de chaque niveau à la configuration f^{13} sp, donne une idée de l'intérêt du traitement multiconfigurationnel dans cette étude paramétrique.

La notation utilisée pour les vecteurs est la suivante :

- les deux états d'un électron nl sont désignés dans l'ordre croissant de leurs énergies par les lettres A et B.
- les coeurs constitués de plusieurs électrons équivalents et les groupes d'électrons optiques associés, sont désignés par les termes LS purs.

L'adjonction d'un astérisque signale que les fonctions propres réelles ont été choisies dans le couplage $J_1 j_2$.

Exemples :

A 3P0 signifie $((f^{13}) [^2F] 7/2, (sp) ^3P_0)$
 B 1P1 " $((f^{13}) [^2F] 5/2, (sp) ^1P_1)$

TABLEAU		9	CONFIGURATION		4F12 5D6S2 + 4F13 6S6P			
E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ COEUR (F12) LS (F12) REFL		F13SP 0/0	
MATRICE J=1/2								
27382	27314.5	-68	0.000	-0.015	100	B3P0		100
31362			0.295		52	3F2A + 32 3F3B	60 *3F2A	
33935			1.798		-64	3F2B - 15 1D2B	79 *3F2B	
34144			1.271		63	3F3B - 17 3F2A	63 *3F3B	
44616			0.732		-34	1D2A + 34 3P2A	76 *1D2A	
47726			1.811		38	1D2B + 28 3P2B	-79 *1D2B	
51888			0.364		76	3P1A - 9 1D2B	-76 *3P1A	
56784			2.121		-61	3P2A - 31 1D2A	94 *3P2A	
59532			0.941		-64	3P2B + 29 1D2B	96 *3P2B	
MATRICE J=3/2								
19175	19132.2	-43	0.871	0.88	-99	A3P2		100
23818	23882.4	64	0.904		37	3F4B + 34 1G4B	-87 *3F4B	
26461	26488.7	27	0.831	0.85	-86	B3P1 - 11 B3P2		100
27775			0.717		28	B3P2 - 22 3H4B	-36 *3H4B	31
28083	28143.7	60	0.705	0.66	-60	B3P2 - 10 3H4B		69
30679	30585.7	-94	1.048	1.085	-32	3F3A + 31 3F2A	46 *3F2A	
31519	31520.9	2	0.819	0.79	-40	3F3A - 20 3H4B	-40 *3F3A	7
32883	32928.7	46	0.916	0.935	48	3F3B - 40 B1P1	-48 *3F3B	41
33440	33489.4	50	1.471	1.468	45	3F2B + 18 3F3B	57 *3F2B	11
34968	35089.7	122	0.878	0.85	-33	B1P1 - 21 3F3B		34
39653	39514.7*	-140	0.783	0.80	-53	1G4B + 17 3H4B	-84 *1G4B	3
44580			0.949		-38	3P2A + 26 1D2A	-82 *1D2A	
46780			1.215		-45	1D2B - 28 3P2B	83 *1D2B	
52058			1.103		-54	3P0A + 15 3P1B	56 *3P0A	
53359			0.630		50	3P1A + 29 3P0A	-50 *3P1A	
56191			1.176		-38	3P1B + 37 3P1A	38 *3P1B	

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ COEUR (F12) LS	(F12) REEL	F13SP O/O
56959			1.123		-37 3P2A - 31 3P1B	63 *3P2A	
58768			1.327		64 3P2B - 29 1D2B	95 *3P2B	
93687			0.800		94 1S0A - 5 3P0A	99 *1S0A	
MATRICE J=5/2							
17703	17752.6	49	1.164	1.186	-88 A3P1 - 9 A3P2		100
19517	19548.8	31	1.010	0.983	90 A3P2 - 9 A3P1		99
21124	21161.4	37	1.147	1.14	49 3F4A + 29 1G4A	-86 *3F4A	1
22901	22929.7	28	1.147	1.152	-27 3H5B - 20 3F4B	-44 *3F4B	9
24418	24417.9	0	1.077	1.06	50 A1P1 + 32 3H5B		52
25660	25656.0	-4	0.746	0.724	86 B3P0 + 6 B3P1		95
25716	25745.1	29	1.038	1.09	-28 A1P1 - 11 3F4A		37
26140	26126.9	-13	1.112	1.10	87 B3P1 - 7 B3P0		99
28202	28051.3	151	0.988	0.96	25 B3P2 + 18 3H4A	-34 *3H4A	29
28420	28448.5	28	1.006	1.000	-71 B3P2 + 7 3H4A		75
29885	30082.2	197	0.829	0.81	-29 3F2A + 20 3H4B	35 *3F2A	3
30427	30302.4	-124	0.905	0.91	22 3H4B + 18 3F2A	34 *3H4B	2
31425	31431.9	7	1.058	1.07	42 3F3A - 16 3F2B	-42 *3F3A	1
32333	32174.5	-159	1.174	1.16	-72 3F3B + 6 3F3A	-72 *3F3B	4
34179	34085.2	-94	0.965	0.95	45 B1P1 - 20 3F2B		47
35213	35026.2	-187	0.973	1.022	26 B1P1 + 23 3F2B	26 *3F2B	29
38025	38014.4	-10	1.104	1.11	40 1G4B - 21 3H4B	-67 *1G4B	1
40718	40787.2	69	0.901	0.91	-24 1G4A + 20 3H4A	46 *1G4A	12
43849			1.001		-33 1D2A + 31 3P2A	87 *1D2A	3
46695			1.128		46 1D2B - 29 3P2B	-92 *1D2B	
52386			1.265		-33 3P0B + 18 1D2A	-36 *3P2A	
53853			1.067		82 3P1A + 7 3P2A	-82 *3P1A	
54997			1.094		30 3P2A + 28 3P0B	-46 *3P2A	
56623			0.912		-34 3P1B - 25 3P0B	-34 *3P1B	

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ COEUR (F12) LS (F12) REEL		F13SP 0/0
57196			1.530		58 3P1B + 21 3P2B	-58 *3P1B	
95468			1.200		-94 150B + 5 3P0B	-99 *150B	
MATRICE J=7/2							
16800	16742.2	-58	1.323	1.325	-78 A3P0 + 17 A3P1		99
16995	16957.0	-38	1.163	1.169	70 3H6B + 7 3F4A	71 *3H6B	8
17387	17343.3	-44	1.030	1.022	77 A3P1 + 16 A3P0		94
19707	19753.8	46	1.185	1.18	-95 A3P2 - 2 A3P0		99
21247	21120.8	-126	1.183	1.175	54 3F4A + 21 1G4A	80 *3F4A	3
22908	22791.8	-116	1.139	1.14	-75 3H5A + 5 3F4B	75 *3H5A	5
23843	23873.2	30	1.100	1.135	-37 3F4B + 22 A1P1	59 *3F4B	23
25739	25717.2	-22	1.023	1.02	70 3H5B - 12 A1P1	70 *3H5B	14
26394	26439.5	46	1.000	1.000	92 B3P1 - 4 B3P2		98
26862	26701.3	-161	1.093	1.076	-39 A1P1 + 13 3H4A	-27 *3H4A	41
28518	28555.8	37	1.156	1.157	96 B3P2 + 4 B3P1		100
29218	29260.6	42	0.920	0.928	46 3F3A + 11 3H4A	-46 *3F3A	2
30151	30124.0	-27	0.967	0.955	-24 3H4B + 15 3F4B	46 *3H4B	3
31468	31510.2	42	1.097	1.11	22 3F3B - 17 3F2B	25 *3H4A	5
32448	32446.3	-2	0.926	0.89	41 3F2A - 10 3H4B	-51 *3F2A	11
32665	32811.0	146	1.059	1.04	-69 3F3B - 8 3H4A	-69 *3F3B	2
33616	33623.7	8	0.923	0.92	-39 3F2B - 11 3F3A	-50 *3F2B	6
34257	34297.3	41	0.911	0.915	74 B1P1 + 4 1G4A		76
38529	38342.6	-187	1.058	1.108	-30 1G4B + 27 3H4B	-57 *1G4B	4
39540	39560.5	21	0.856	0.895	-27 1G4A + 22 3H4A	-54 *1G4A	4
44359	44323.0	-36	1.164	1.090	-19 3P2A - 19 1D2A	-47 *1D2A	
45928			1.001		22 1D2A + 20 1D2B	46 *1D2B	
50311			0.894		93 116B + 2 B1P1	-94 *116B	2
53587			1.307		-37 3P1B - 25 1D2B	47 *3P2B	
55388			1.174		40 3P1B - 34 3P2A	-53 *3P2A	

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ		FI ₃ SP 0/0
					COEUR (F12) LS	(F12) REEL	
56852			1.095		35 3P2B + 21 3P2A	47 *3P2B	
MATRICE J=9/2							
13296	13119.6	-176	1.309	1.305	-86 3H6A + 8 3H6B	87 *3H6A	
17590	17613.6	24	1.192	1.188	-94 A3P1 + 3 A3P2		99
18693	18837.4	144	1.134	1.13	-76 3H6B - 6 3H6A	76 *3H6B	4
19713	19748.5	36	1.278	1.29	97 A3P2 + 3 A3P1		99
21691	21737.7	46	1.116	1.13	-61 3F4A + 25 1G4A	-90 *3F4A	
23748	23781.7	34	1.149	1.14	49 3F4B + 21 1G4B	76 *3F4B	12
24257	24348.7	91	1.116	1.12	-44 3H5A + 28 A1P1	44 *3H5A	29
26613	26646.2	33	0.994	0.961	-34 3H5A - 25 3H5B	34 *3H5A	20
26836	26889.1	53	1.080	1.11	52 3H5B - 31 A1P1	-52 *3H5B	31
28061	28023.9	-37	1.142	1.15	-99 B3P2		100
29404	29316.7	-88	0.934	0.978	-50 3H4A - 21 3F4A	87 *3H4A	2
30886	30915.0	28	0.990	0.990	-28 3F3A - 27 3H4B	46 *3H4B	1
31419	31440.6	22	1.132	1.13	-37 3F3A + 30 3F3B	37 *3F3A	
32538	32407.8*	130	1.014		58 3F3B + 18 3F3A	58 *3F3B	
34620			0.992		-58 3F2B - 14 1D2B	-74 *3F2B	
37939	38120.7	182	0.902		50 1G4A - 38 3H4A	-96 *1G4A	
39857	39768.7	-88	1.029		49 1G4B + 37 3H4B	93 *1G4B	
47037			1.163		-40 1D2B + 38 3P2B	-95 *1D2B	
48377			1.109		80 116A + 15 116B	-81 *116A	1
52897			0.915		83 116B - 16 116A	-83 *116B	
57470			1.239		59 3P2B + 35 1D2B	98 *3P2B	

MATRICE J=11/2

15586	15587.8	2	1.246	1.255	-76 3H6A + 20 3H6B	76 *3H6A	
18925	18990.4	66	1.216	1.215	68 A3P2 + 21 3H6B		68
19017	18853.8	-163	1.158	1.15	-48 3H6B + 32 A3P2	48 *3H6B	32
21952	21997.4	46	1.061	1.06	40 3F4A + 26 1G4A	-76 *3F4A	

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ		F13SP 0/0
					COEUR (F12) LS	(F12) REEL	
23265	23309.9	45	1.117	1.11	56 3F48 + 25 1G48	87 *3F48	
25538	25488.5	-49	1.012		-91 3H5A + 2 3F4A	91 *3H5A	
27573	27491.3	-82	1.070		-88 3H5B - 9 3F3B	-88 *3H5B	
28154			0.917		-54 3H4A + 31 3F4A	89 *3H4A	
31082			1.061		46 3H4B + 19 3F4B	82 *3H4B	
33567			1.117		79 3F3B - 7 3H5B	79 *3F3B	
36745			0.921		57 1G4A - 27 3H4A	-96 *1G4A	
39769			1.038		-51 1G4B - 39 3H4B	97 *1G4B	
51851			1.060		88 116A - 10 116B	89 *116A	
54445			0.957		88 116B + 10 116A	-89 *116B	

MATRICE J=13/2

17305	17454.7	150	1.133	1.154	-95 3H6A - 2 3F4B	95 *3H6A	
19364	19466.6	102	1.155	1.15	-85 3H6B + 9 3F4B	-85 *3H6B	
23267	23374.6	108	0.985	0.98	-87 3H5A - 4 3H6B	-87 *3H5A	
24110	24137.2	27	1.129	1.128	43 3F4B - 28 1G4B	79 *3F4B	
27377	27377.1	0	1.103	1.12	92 3H5B - 5 3H5A	92 *3H5B	
30133			1.053		58 3H4B + 32 3F4B	97 *3H4B	
38832			1.059		57 1G4B - 30 3H4B	99 *1G4B	
53155			0.989		98 116A + 1 3H6A	-99 *116A	
54959			1.024		98 116B - 1 3H6B	99 *116B	

MATRICE J=15/2

15155	15271.0	115	1.081	1.08	-96 3H6A + 2 3H6B	97 *3H6A	
18664	18693.1	29	1.181	1.18	97 3H6B + 2 3H6A	98 *3H6B	
25008	25130.4	122	1.092	1.10	-99 3H5B	99 *3H5B	
47613			0.944		91 116A	91 *116A	
54980			1.066		91 116B	91 *116B	

MATRICE J=17/2

16183	16456.9	274	1.175	1.175	99 3H6B	100 *3H6B	
-------	---------	-----	-------	-------	---------	-----------	--

E	E	ΔE	G	G	COMPOSITION EN JJ		F13SP
CALC.	OBS.		CALC.	OBS.	COEUR (F12) LS	(F12) REEL	0/0
99376			1.060		99 1168	100 • 1168	

3H6 A signifie $((f^{12}) \ ^3H_6, (d) \ [^2D] \ 3/2)$

*3F4 B " $((f^{12}) \ [63 \ ^3F + 29 \ ^1G - 8 \ ^3H] \ 4, (d) \ [^2D] \ 5/2)$.

Les niveaux observés marqués d'un astérisque n'ont pas été introduits dans les équations de moindres carrés pour l'optimisation des paramètres.

$$2 - 4f^{13} \ 5d6p$$

Les éléments des matrices de $f^{13}dp$ ont été calculés à Jérusalem. Le terme 3F_2 de $f^{14}dp$ dans Yb I étant situé à 43433 cm^{-1} , la position de $f^{13}dp$ a été localisée vers 39000 cm^{-1} . J. SUGAR a donné la première interprétation de cette configuration avec un écart quadratique moyen de 205 cm^{-1} pour 30 niveaux observés.

L'analyse des structures Zeeman et des spectres d'absorption pris à Argonne, nous ont permis de changer quelques interprétations et de trouver 10 niveaux manquants.

Actuellement, 40 niveaux sur un total de 113 sont identifiés. L'écart $\overline{\Delta E}$ correspondant est de 152 cm^{-1} .

Le jeu de paramètres est donné dans la table 2.

L'intégrale de structure fine ζ_f est fixée car tous les niveaux interprétés sont construits sur le parent $^2F_{7/2}$ de f^{13} . Plusieurs couplages intermédiaires ont été étudiés et leurs puretés sont les suivantes :

Couplage : LS $j_1 L_2$ $j_1 J_2$

$(((((f^{13}) \ ^2F, d) \ S_1 L_1) \ p \ SL) \ (((f^{13}) \ j_1, (dp) L_2) \ S_2 K) \ ((f^{13}) j_1, (dp) [S_2 L_2] J_2)$

Pureté : 33 % 51 % 60 %

TABLE 2 - Paramètres de $4f^{13}5d6p$.

Paramètres	Valeurs (cm^{-1})	Ecart-types (cm^{-1})
T	47769	53
F_2 (fd)	78	3,1
F_4 (fd)	6,9	F_4/F_3 fixé
G_1 (fd)	69	12
G_3 (fd)	6,7	fixé
G_5 (fd)	3	0,7
F_2 (fp)	43	6,4
G_2 (fp)	13,6	fixé
G_4 (fp)	7,4	fixé
F_2 (dp)	196	14
G_1 (dp)	331	14
G_3 (dp)	15	G_3/G_1 fixé
ζ_f	2476	fixé
ζ_d	664	45
ζ_p	1190	70
N = 40		$\overline{\Delta E} = 152 \text{ cm}^{-1}$

TABLEAU 10 CONFIGURATION 4F13 5D6P .

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ O/O
MATRICE J=1/2					
41220	41089.0	-131	1.662	1.50	89 A3F3 + 5 A1F3 + 3 A3F4
43756			1.101		88 A3F4 - 5 A3F3 + 2 A3D3
44516			1.143		-54 A3D3 + 37 A1F3 + 6 B3F2
45358			1.200		49 A1F3 + 39 A3D3 - 4 A3F4

MATRICE J=3/2					
38510	38318.6	-191	1.704	1.195	80 A3F2 + 9 A3F3 + 8 A1D2
40930	40693.6	-236	1.333	1.31	-49 A3F3 + 36 A1D2 + 9 A3F4
42442	42357.4	-85	1.101	1.18	-37 A1D2 - 32 A3F3 + 19 A3F2
43224	43221.8	-2	1.198	1.20	-60 A3D2 + 17 A3P2 + 10 A1D2
43713	43800.8	88	1.127	1.21	83 A3F4 + 7 A3F3 - 5 A3D2
44463	44545.9	83	1.067	1.10	62 A3D3 - 26 A1F3 - 3 A3D2
45882			1.047		57 A3P2 + 17 A1F3 + 14 A3D2
46456			1.082		-45 A1F3 - 28 A3D3 + 18 A3P2

MATRICE J=5/2					
39393	39547.3	154	1.313	1.285	52 A3F2 - 21 A1D2 - 9 A3F3
41091	41493.0	402	1.333	1.29	-35 A3F3 + 33 A1D2 - 11 A3F4
41643	41544.6	-99	1.290	1.25	54 A3D1 - 22 A3F2 + 7 A1P1
42527	42596.5	69	1.042		39 A3F3 + 19 A1D2 + 19 A3F2
43635	43481.2	-154	1.075		71 A3D2 + 17 A3F4 + 6 A3P2
43871	43958.1	87	1.187	1.11	51 A3F4 + 15 A1D2 - 11 A3D2
44430	44518.9	89	1.149	1.205	-44 A3D3 + 18 A3F4 - 12 A1F3
45127			1.170		50 A3P1 - 19 A3D3 - 13 A3D1
45979	45908.3	-71	1.120		-68 A3P2 + 15 A1P1 + 6 A3D2
46722			1.096		-45 A1F3 + 15 A3D3 - 14 A1P1
47450			1.116		41 A1P1 - 32 A1F3 - 16 A3P1

E	E	ΔE	G	G
CALC.	OBS.		CALC.	OBS.

COMPOSITION EN JJ
0/0

MATRICE J=7/2

40781	40802.5	22	1.147	1.185	-65 A3F2 - 26 A1D2 + 6 A3F3
41555	41617.3	62	1.337	1.29	22 A3F3 - 18 A3D2 + 15 A1D2
42421	42543.1	122	1.186	1.12	70 A3D1 - 11 A3F3 - 7 A1D2
42845	42783.5	-61	1.012		-41 A3F3 - 22 A3F2 + 15 A1D2
43231	43098.0	-133	1.144		-30 A1D2 - 21 A3D2 - 14 A3D1
43893	43981.1	88	1.076		35 A3D2 + 19 A3P1 - 14 A3D3
44287	44265.3	-21	1.140	1.10	-66 A3F4 + 19 A3P1 - 6 A1P1
44871	44750.1	-121	1.304	1.16	-43 A3D3 + 29 A3P0 - 17 A3P1
45122	45131.8	10	0.986		41 A3P0 + 12 A3P1 - 12 A3D2
46134			1.175		66 A3P2 - 9 A1F3 + 8 A3P0
47297			1.106		64 A1F3 - 14 A1P1 + 8 A3P2
48040			1.117		61 A1P1 + 21 A1F3 + 10 A3P1

MATRICE J=9/2

40794	41074.4	281	1.073	1.07	-45 A3F2 - 41 A1D2 + 3 A3D1
42270	42139.0	-131	1.042	1.06	-74 A3D1 + 9 A1P1 + 7 A3P1
42617	42667.7	51	1.101	1.10	-41 A1D2 + 41 A3F2 - 6 A3D2
42807	42764.6	-43	1.074		86 A3F3 + 6 A3F2 - 4 A3P1
43734	43755.6	22	1.105	1.08	86 A3D2 - 8 A1D2 + 2 A3P1
44190	44380.9	191	1.225	1.15	43 A3D3 + 31 A3P1 + 10 A3D1
44559	44582.6	24	1.201	1.07	75 A3F4 - 9 A3D3 - 9 A3P2
45385			1.183		-38 A3D3 + 32 A3P1 + 13 A1P1
45802			1.191		69 A3P2 + 12 A3F4 + 10 A1P1
46727			1.162		40 A1P1 + 25 A1F3 - 14 A3P1

MATRICE J=11/2

40168	40128.3	-40	0.987	1.10	-74 A3F2 + 22 A1D2 + 1 A3F3
42016	42080.2	64	1.111	1.12	58 A1D2 + 20 A3F2 + 15 A3P2
42596	42429.4	-167	1.142	1.19	45 A3F3 + 31 A3D2 - 11 A1D2

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ O/O
43328	43196.8	-131	1.169		-49 A3F3 + 40 A3D2 - 3 A3D3
43984	43788.4	-195	1.172	1.17	-37 A3D3 + 19 A3P2 + 19 A3F4
44554	44417.5	-136	1.199	1.17	56 A3F4 + 38 A3D3 + 3 A3P2
46092	46262.1	170	1.241	1.15	-50 A3P2 + 24 A3F4 - 13 A3D3
47702			1.085		-92 A1F3 + 5 A3D3 + 1 A3P2

MATRICE J=13/2

41447	41469.0	22	1.110	1.15	96 A3F3 + 2 A3D3 - 1 A3F4
43784	43836.7	52	1.210	1.18	76 A3D3 + 14 A3F4 + 8 A1F3
44751			1.199		81 A3F4 - 10 A1F3 - 7 A3D3
46197			1.105		82 A1F3 - 14 A3D3 + 4 A3F4

MATRICE J=15/2

42686			1.200		100 A3F4
-------	--	--	-------	--	----------

Le couplage j, J est ici le plus proche du couplage physique et les trois premiers coefficients des vecteurs propres seront donnés dans le tableau 10 à l'aide de la notation symbolique définie pour (1).

$f^{13} \text{ sp.}$	00.1	00.15221	5121
	00.1	10.78221	5111
	01	10.42221	5121

Nous limiterons les résultats aux niveaux construits sur $^2F_{7/2}$ du coeur f^{13} car les 55 niveaux construits sur le parent $^2F_{5/2}$ ont tous une énergie égale ou supérieure à l'énergie d'ionisation de l'atome neutre. 40 niveaux sur 58 du parent $^2F_{7/2}$ sont identifiés et les multiplets $^3F_{2,3}$, 1D_2 et $^3D_{1,2}$ de $5d6p$ sont complets. Les niveaux provenant du terme 1P_1 de $5d6p$ demeurent inconnus et nous n'avons pas cru nécessaire, pour le moment, d'introduire l'interaction de configuration avec $f^{13} \text{ sp.}$

L'accord théorie-expérience est loin d'être excellent. En particulier, le niveau $38318 J = 3/2$ est probablement mélangé avec les niveaux non encore identifiés 38237 et $39635 J = 3/2$. Le facteur de Landé observé 1,19 est très loin de la valeur calculée 1,70. En raison de la grande densité des niveaux pairs élevés, nous avons sélectionné, de préférence, ceux dont les transitions avec les niveaux de $f^{13} \text{ ds}$, sont intenses.

D'autre part, tant que les configurations plus profondes $f^{12} \text{ ds}$ et, peut-être, $f^{12} \text{ sp}$ n'auront pas été identifiées, l'interprétation de $f^{13} \text{ dp}$ sera sujette à caution. Nous verrons plus loin que les termes 1P_1 de la configuration $f^{13} 6s8p$ sont aussi fortement mélangés avec $f^{13} \text{ dp}$.

3 - Liste des niveaux pairs

La liste rassemble les énergies de 164 niveaux pairs dont la plupart sont vérifiés à l'aide de l'effet Zeeman. Les niveaux sont groupés en multiplet, suivant les désignations énoncées pour les couplages étudiés. Au total, les 24 niveaux de $f^{13} \text{ sp}$ sont connus et 58 niveaux sur 107 de $f^{12} \text{ ds}$ sont interprétés. Tous les niveaux profonds de $f^{12} \text{ ds}$, construits à

LISTE I

NIVEAUX PAIRS DE TMI.

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F12(03H6) 5D 6S2	(4,3/2)	9/2	13119.62	1.305
		15/2	15271.00	1.08
		11/2	15587.81	1.255
		13/2	17454.81	1.15
.. ..	(4,5/2)	17/2	16456.90	1.175
		7/2	16957.01	1.169
		15/2	18693.07	1.18
		9/2	18837.38	1.13
		11/2	18853.82	1.15
		13/2	19466.66	1.15
4F13(2F7/2) 6S6P(3P)	(7/2,0)	7/2	16742.24	1.325
.. ..	(7/2,1)	7/2	17343.38	1.022
		9/2	17613.66	1.188
		5/2	17752.64	1.186
.. ..	(7/2,2)	11/2	18990.41	1.215
		3/2	19132.25	0.88
		5/2	19548.84	0.983
		9/2	19748.54	1.29 1Z
		7/2	19753.83	1.18 1Z
4F12(03F4) 5D 6S2	(4,3/2)	7/2	21120.84	1.175
		5/2	21161.41	1.14
		9/2	21737.69	1.13
		11/2	21997.48	1.06
4F12(3H5) 5D 6S2	(5,3/2)	7/2	22791.18	1.14
		13/2	23374.68	0.98
		9/2	24348.70	1.12
		11/2	25488.55	
4F12(03F4) 5D 6S2	(4,5/2)	5/2	22929.72	1.152
		11/2	23309.98	1.11
		9/2	23781.70	1.14
		7/2	23873.22	1.135
		3/2	23882.4	
		13/2	24137.19	1.128
4F12(3H5) 5D 6S2	(5,5/2)	15/2	25130.45	1.10
		7/2	25717.20	1.02
		5/2	25745.12	1.09
		9/2	26646.21	0.961
		13/2	27377.14	1.12
		11/2	27491.31	
4F13(2F5/2) 6S6P(3P)	(5/2,0)	5/2	25656.02	0.724
.. ..	(5/2,1)	5/2	26126.90	1.10
		7/2	26439.48	1.000
		3/2	26488.67	0.85

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F13(2F7/2) 6S6P(1P)	(7/2,1)	5/2	24418.03	1.06
		7/2	26701.33	1.076
		9/2	26889.13	1.11
4F13(2F5/2) 6S6P(3P)	(5/2,2)	1/2	27314.54	-0.015
		9/2	28023.93	1.15
		3/2	28143.66	0.66
		5/2	28448.56	1.000
		7/2	28555.79	1.157
4F12(*3H4) 5D 6S2	(4,3/2)	5/2	28051.37	0.96
		9/2	29316.67	0.978
		7/2	31510.24	1.11
" "	(4,5/2)	5/2	30302.43	0.91
		7/2	30124.03	0.955
		9/2	30915.01	0.99
4F12(3F3) 5D 6S2	(3,3/2)	7/2	29260.57	0.928
		5/2	31431.88	1.07
		9/2	31440.54	1.13
		3/2	31520.99	0.79
4F12(*3F2) 5D 6S2	(2,3/2)	5/2	30082.19	0.81
		3/2	30585.67	1.085
		7/2	32446.28	0.89
4F12(3F3) 5D 6S2	(3,5/2)	5/2	32174.47	1.16
		9/2	32407.78	
		7/2	32811.02	1.04
		3/2	32928.75	0.935
4F12(*3F2) 5D 6S2	(2,5/2)	3/2	33489.36	1.468
		7/2	33623.78	0.92
		5/2	35026.23	1.022
4F13(2F5/2) 6S6P(1P)	(5/2,1)	5/2	34085.21	0.95
		7/2	34297.17	0.915
		3/2	35089.67	0.85
4F12(*1G4) 5D 6S2	(4,5/2)	5/2	38014.39	1.11
		7/2	38342.59	1.108
		3/2	39514.75	0.80
		9/2	39768.70	
" "	(4,3/2)	9/2	38120.66	
		7/2	39560.40	0.895
		5/2	40787.24	0.91
4F12(*1D2) 5D 6S2	(2,3/2)	7/2	44323.01	1.09
4F13(2F7/2) 5D6P(3F)	(7/2,2)	3/2	38318.65	1.195
		5/2	39547.32	1.285
		11/2	40128.39	1.10
		7/2	40802.58	1.185

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F13(2F7/2) 5D6P(3F)	(7/2,2)	9/2	41074.46	1.07
'' ''	(7/2,3)	3/2	40693.66	1.31
		1/2	41089.07	1.50
		13/2	41469.43	1.15
		11/2	42429.39	1.19
		5/2	42596.50	
		9/2	42764.67	
		7/2	42783.50	
4F13(2F7/2) 5D6P(1D)	(7/2,2)	5/2	41493.05	1.29
		11/2	42080.16	1.12
		3/2	42357.4	
		9/2	42667.74	1.10
		7/2	43098.10	
4F13(2F7/2) 5D6P(3D)	(7/2,1)	5/2	41544.60	1.25
		7/2	42543.14	1.12
		9/2	42139.00	1.06
'' ''	(7/2,2)	11/2	43196.87	
		3/2	43221.86	1.20
		5/2	43481.27	
		9/2	43755.65	1.08
		7/2	43981.12	
4F13(2F7/2) 5D6P(3F)	(7/2,4)	3/2	43800.89	1.21
		5/2	43958.11	1.11
		7/2	44265.31	1.10
		11/2	44417.47	1.17
		9/2	44582.63	1.07
4F13(2F7/2) 5D6P(3D)	(7/2,3)	13/2	42836.66	1.18
		11/2	43788.40	1.17
		9/2	44380.90	1.15
		5/2	44518.93	1.205
		3/2	44545.95	1.10
		7/2	44750.09	1.16
4F13(2F7/2) 5D6P(3P)	(7/2,0)	7/2	45131.77	
'' ''	(7/2,2)	11/2	46262.14	1.15
		5/2	35261.78	1.346
		5/2	37064.22	1.42
		3/2	37138.60	1.56
		9/2	37576.84	1.19
		9/2	37711.08	1.14
		7/2	38123.07	1.14
		5/2	38128.45	1.05
		3/2	38237.91	1.04
		5/2	38396.33	1.07

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
		11/2	38844.07	1.08
		5/2	39259.96	1.20
		3/2	39635.59	1.34
		7/2	39847.08	1.285
		11/2	39942.58	1.191
		5/2	40066.74	1.36
		3/2	40091.59	1.13
		11/2	40503.33	1.105
		13/2	40586.39	1.175
		13/2	40855.53	1.17
		9/2	41151.10	
		11/2	41352.81	1.07
		9/2	41391.12	1.17
		11/2	41430.24	1.20
		11/2	41700.24	1.13
		9/2	41728.02	1.06
		5/2	41751.05	1.08
		5/2	42198.81	1.25
		13/2	42456.46	1.20
		13/2	42545.12	
		11/2	42595.80	1.20
		13/2	42868.25	
		13/2	42869.73	
		7/2	42952.02	1.14
		11/2	42957.14	
		5/2	43056.25	0.93
		7/2	43303.17	
		5/2	43494.21	
		11/2	43715.58	
		7/2	44206.41	1.04
		11/2	44276.40	1.16
		7/2	44323.01	1.09
		13/2	44515.01	1.125
		7/2	44529.41	0.95
		9/2	44689.92	1.00
		9/2	44919.31	1.19

- Diagramme d'énergie des niveaux pairs de Tm I. -

partir des termes parents 3H_6 , 3F_4 et 3H_5 de f^{12} sont établis.

L'étude paramétrique de $f^{13}sp + f^{12}ds$ a montré [40] que ces deux configurations étaient très mélangées, en particulier, les termes A^1P_1 et B^1P_1 de $f^{13}sp$. La figure 9 représente le schéma des énergies des niveaux. Tous ceux situés en dessous de 35000 cm^{-1} ont reçu une interprétation.

La colonne de droite montre le spectre en énergie des niveaux non identifiés qui peuvent appartenir aux configurations élevées, $f^{12}d^2$ (893 niveaux) et $f^{12}sp^2$ (331 niveaux). Ces niveaux ne sont pas encore assez nombreux pour justifier le calcul paramétrique de configurations aussi étendues.

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les paramètres de Slater sont donnés dans le tableau 1.

Les paramètres de Racah sont donnés dans le tableau 2.

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

Les données expérimentales sont comparées aux calculs effectués avec les paramètres de Slater [41] et de Racah [42].

II - 4 - CONFIGURATIONS IMPAIRES

$$1 - 4f^{13}_{5d6s} + 4f^{12}_{6s^2}6p.$$

Les matrices de f^{13}_{ds} et $f^{12}_{s^2p}$ sont assemblées en une seule configuration. L'interaction électrostatique entre f^n_{ds} et $f^{n-1}_{s^2p}$ fait intervenir deux intégrales de Slater, $R^2(ps, fd)$ et $R^3(ps, df)$. Les parties angulaires de R^2 et R^3 entre les fonctions de base, $((f^{n-1}) \bar{S}\bar{L}, p) SL s^2 SL$ pour $f^{n-1}_{s^2p}$ et $((f^n) S_1 L_1, d) S_2 L_2, s) S^1 L^1_2$ pour f^n_{ds} , sont données par les formules (8) et (9) de l'annexe. Les valeurs initiales des paramètres sont celles des configurations paires f^{13}_{sp} et $f^{12}_{ds^2}$ précédemment étudiées. Le signe des paramètres $R^2(ps, fd)$ et $R^3(ps, df)$ est celui des intégrales HF.

Le jeu de paramètres, obtenu pour la dernière itération, est donné dans la table 3.

36 niveaux de f^{13}_{ds} sur 39, et 28 de $f^{12}_{s^2p}$ sur 69, sont interprétés avec un écart quadratique moyen $\overline{\Delta E}$ de 79 cm^{-1} ; écart qui représente 0,3 % de l'intervalle d'énergie dans lequel ces niveaux sont situés. Les deux niveaux profonds, 20406 $5/2$ et 21799 $3/2$ de f^{13}_{ds} , dont les transitions avec f^{13}_{sp} sont situées dans l'infrarouge lointain, ont été mis en évidence tout à la fin de l'étude paramétrique grâce à l'effet Zeeman des transitions visibles avec les niveaux pairs élevés. La prévision avec une incertitude de 100 cm^{-1} des énergies des niveaux de f^{13}_{ds} , construits à partir du parent $^2F_{5/2}$ de f^{13} , a orienté les recherches dans la meilleure des voies.

Nous tenons à rappeler que sans la liste des longueurs d'onde infrarouges mesurées par J. VERGES [13] à l'aide du SISAM, aucune de ces configurations n'aurait pu être définitivement établie.

TABLE 3 - Paramètres de $4f^{13}5d6s + 4f^{12}6s^26p$

Paramètres	Valeurs (cm^{-1})	Ecart-types (cm^{-1})
T	28 529	25
$\Delta (f^{13}_{ds} - f^{12}_{s^2p})$	10 170	194
$E^1 (f^{12})$	6 994	39
$E^2 (f^{12})$	33,7	E^2/E^1 fixé
$E^3 (f^{12})$	673	E^3/E^1 fixé
$F_2 (fd)$	93,7	1,7
$F_4 (fd)$	7,2	0,5
$G_1 (fd)$	78,9	2,2
$G_3 (fd)$	10,7	1,3
$G_5 (fd)$	2,2	0,3
$F_2 (fp)$	56,8	4
$G_2 (fp)$	4,9	0,9
$G_4 (fp)$	5,5	2
$G_3 (fs)$	150	fixé
$G_2 (ds)$	1 355	20
$\zeta_f (f^{13})$	2 505	9
$\zeta_f (f^{12})$	2 632	8
ζ_d	363	20
ζ_p	2 059	24
$R^2 (fd, ps)$	- 1 097	328
$R^3 (fd, sp)$	- 1 705	421
N = 64		$\Delta \bar{E} = 79 \text{ cm}^{-1}$

Les deux niveaux manquants $J = \frac{1}{2}$ de f^{13}_{ds} ont une probabilité extrêmement faible d'être trouvés, en raison du nombre très réduit (2) des transitions possibles avec les niveaux pairs de f^{13}_{sp} .

La pureté des vecteurs propres, dans les couplages L et intermédiaires étudiés pour f^{13}_{ds} , est la suivante :

Couplage : LS	$j_1 j_2$	$j_1 L_2$
$((((f^{13})^2_{F,d}) S_1 L_1 s) S L_1)$	$((f^{13})_{j_1}, (ds) [S_2 L_2] J_2)$	$((f^{13})_{j_1}, (ds) L_2) S_2 K)$
Pureté : 55 %	71 %	81 %

Le couplage $j_1 L_2$, déjà étudié par G. RACAH [41] pour la configuration f^{13}_{ds} de Yb II, est le plus proche du couplage réel. Le moment orbital L_2 du groupe d'électrons 5d6s est orienté dans le champ électrostatique du coeur f^{13} et couplé avec son propre moment de spin S_2 . Ce couplage est la conséquence des faibles valeurs de l'interaction électrostatique $Q(f^{13}_d)$ et de l'intégrale spin-orbite de l'électron 5d, en comparaison de la grande séparation des états singulet et triplet de 5d6s. Le moment angulaire K, qui résulte du couplage de j_1 et L_2 , est associé à la valeur du spin S_2 pour donner les valeurs de J.

Le couplage $J_1 j_2$ de la configuration $f^{12}_s s^2_p$ a été étudié dans les deux hypothèses définies pour la configuration $f^{12}_{ds^2}$; celle du coeur f^{12} pur LS et celle du coeur réel, défini par les fonctions propres de f^{12} obtenues à l'aide des paramètres E^1, E^2, E^3 et ζ_f de $f^{12}_{ds^2}$.

Les puretés dans ces couplages sont :

Couplage : LS	$J_1 j_2$	$*J_1 j_2$
$((f^{12}) S_1 L_1, p) S L)$	Coeur f^{12}_{LS}	Coeur f^{12} réel
	$((f^{12}) [S_1 L_1] J_1, (\bar{p}) j_2)$	$((f^{12})^* [S_1 L_1] J_1, (\bar{p}) j_2)$
Pureté : 51 %	73 %	93 %

TABLEAU 11 CONFIGURATIONS 4F13 5D6S + 4F12 6S26P .

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/O				F13DS O/O
					COEUR (F12) LS F13DS JL		(F12) REFL F13DS JJ		
MATRICE J=1/2									
23997	24160.7	163	1.006	1.010	-93 AT3/2 + 4 BS1/2	-93	A3D3	100	
30056			2.186		92 BT1/2 + 5 BS1/2	81	B3D3	100	
32146			0.143		92 BT3/2 - 8 BS1/2	-75	B3D2	100	
34204	34069.2	-135	0.666	0.666	83 BS1/2 + 7 BT3/2	83	B1D2	100	
41032			0.154		-79 3F2B - 19 1D2B	99	*3F2B		
54190			0.939		42 1D2B + 39 3P2B	-97	*1D2B		
58601			0.866		92 3P0A + 5 1S0A	-97	*3P0A		
59152			1.734		92 3P1A + 4 3P1B	92	*3P1A		
62354			0.985		-95 3P1B + 4 3P1A	-95	*3P1B		
65023			1.322		-59 3P2B + 35 1D2B	-98	*3P2B		
100862			0.667		-95 1S0A + 5 3P0A	100	*1S0A		
MATRICE J=3/2									
21835	21799.4	-36	1.456	1.45	72 AT3/2 + 22 AS3/2	-50	A3P2	100	
23738	23574.4	-164	0.836	0.83	-94 AT5/2 + 5 AT3/2	62	A3D3	100	
25175	25207.7	32	1.376	1.365	-72 AS3/2 + 16 AT3/2	-72	A1D2	100	
31546	31499.0	-47	1.293	1.33	-46 BT3/2 + 44 BT1/2	-66	B3D3	100	
32177	32181.4	4	0.682	0.725	-71 BT5/2 + 17 BT1/2	67	B3D1	100	
32715	32779.9	65	1.086	1.05	-48 BT3/2 - 24 BT1/2	-57	B3D2	100	
34910	34999.0	89	0.871	0.897	-96 BS3/2 - 2 BT5/2	-96	B1D2	100	
37676			0.698		-76 3F2A + 20 1D2A	-98	*3F2A		
40369			1.027		-94 3F3B + 4 3F2B	-94	*3F3B		
40888			0.837		73 3F2B - 18 1D2A	93	*3F2B		
50831			1.182		-41 1D2A + 39 3P2A	-98	*1D2A		
54110			1.212		-43 1D2B - 37 3P2B	98	*1D2B		
59465			1.209		-99 3P1A	-99	*3P2B		

E CALC.	E OBS.	Δ E	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/D				F13DS O/D
					COEUR (F12) LS F13DS JL		(F12) REEL F13DS JJ		
60818			1.435		-42	3P2A - 31	1D2A	76 *3P2A	
61836			1.268		-75	3P0B - 10	3P2A	-79 *3P0B	
62912			1.213		-89	3P1B + 3	3P2A	89 *3P1B	
64518			1.520		-55	3P2B + 31	1D2B	-90 *3P2B	
103930			1.333		95	1S0B + 5	3P0B	-100 *1S0B	

MATRICE J=5/2

20593	20406.9	-186	1.573	1.58	97	AT3/2 + 1	AT5/2	50	A301	100
23450	23431.8	-18	1.206	1.22	-82	AT5/2 + 16	AT7/2	-46	A301	100
24609	24611.2	3	0.935	0.92	-77	AT7/2 - 16	AT5/2	52	A303	100
26426	26448.2	22	1.142	1.14	-93	AS5/2 - 6	AT7/2	-93	A102	100
31575	31593.7	19	1.035		-58	3F4B + 31	1G4B	-98	*3F4B	
31859	31773.8	-85	1.245	1.23	85	BT3/2 + 13	BT5/2	52	B302	100
32808	32856.6	49	1.060	1.051	-83	BT5/2 + 13	BT3/2	69	B303	100
33226	33292.7	66	0.625	0.624	-97	BT7/2 - 2	BT5/2	-44	B302	99
35680	35673.6	-6	0.900		97	BS5/2 - 2	BT5/2	-97	B102	100
36994			1.021		82	3F3A + 6	3F2A	82	*3F3A	1
37548			0.868		46	3F2A - 16	3F3A	58	*3F2A	
38521			0.782		-41	3H4B + 25	3F2A	64	*3H4B	
40192			1.157		-95	3F3B + 3	3F2B	95	*3F3B	
40709			0.901		-72	3F2B - 19	1D2B	93	*3F2B	
46886			0.813		58	1G4B + 29	3H4B	99	*1G4B	
50934			1.072		-41	1D2A + 39	3P2A	-98	*1D2A	
53714			1.184		41	1D2B - 39	3P2B	98	*1D2B	
61096			1.215		57	3P2A + 36	1D2A	96	*3P2A	
62277			1.411		-95	3P1B - 2	1D2B	95	*3P1B	
63923			1.226		56	3P2B + 34	1D2B	94	*3P2B	

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/O				F13DS O/O
					COEUR (F12) LS	(F12) REEL			
					F13DS JL	F13DS JL			

MATRICE J=7/2

23226	23335.1	109	1.361	1.362	79 AT5/2 - 20 AT7/2	-48	A3D1	100
24202	24246.4	45	1.046	1.02	-55 AT9/2 - 31 AT7/2	-50	A3D1	100
24779	24708.0	-71	1.058	1.08	49 AT7/2 - 42 AT9/2	76	A3D3	99
27046	27037.5	-9	1.122	1.11	-97 AS7/2 - 1 AT5/2	-97	A1D2	100
28334	28340.2	6	1.195		62 3F4A - 29 1G4A	-99	*3F4A	1
30823	30921.5	98	0.694	0.69	98 BT9/2 - 1 AT9/2	-78	B3D1	100
31631	31694.7	63	1.141	1.17	62 3F4B + 28 1G4B	-98	*3F4B	1
33241	33240.3	-1	1.139	1.17	73 BT5/2 + 23 BT7/2	67	B3D2	98
33432	33396.0	-36	1.034		-49 BT7/2 - 24 3H5B	63	B3D3	72
33842	33778.4	-64	0.958		-68 3H5B + 25 BT7/2	-68	*3H5B	29
35383			1.000		-56 3H4A + 26 3F4A	95	*3H4A	3
36361			0.914		-97 BS7/2	97	B1D2	98
37229	37221.4	-7	1.033		96 3F3A + 3 3H5B	96	*3F3A	
38611	38664.2	53	0.924	1.042	-57 3H4B - 26 3F4B	96	*3H4B	
40073	40061.3	-12	1.145	1.13	-97 3F3B + 2 3F2B	97	*3F3B	
41102	41085.0	-17	0.981	1.005	-75 3F2B - 19 1D2B	-96	*3F2B	
44166	44142.4	-24	1.011	1.02	-56 1G4A - 33 3H4A	-99	*1G4A	
47117			0.929		57 1G4B + 33 3H4B	99	*1G4B	
54114			1.221		42 1D2B + 40 3P2B	100	*1D2B	
64375			1.302		58 3P2B - 37 1D2B	100	*3P2B	

MATRICE J=9/2

22459	22419.7	-39	0.934	0.934	-98 AT11/2 - 2 AT9/2	-83	A3D1	100
23869	23941.0	72	1.287	1.29	82 AT7/2 + 16 AT9/2	69	A3D2	100
24770	24701.1	-69	1.150	1.145	-75 AT9/2 + 17 AT7/2	76	A3D3	94
25726	25699.7	-26	1.121	1.12	88 3H6B - 5 AT9/2	-89	*3H6B	8
27547	27440.8	-106	1.093		95 AS9/2 - 2 AT9/2	-95	A1D2	98

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/O				F13DS
					COEUR (F12) LS		(F12) REFL	O/O	O/O
					F13DS JL		F13DS JL		
28526	28514.4	-12	1.095	1.085	-60	3F4A - 28	1G4A	96 *3F4A	
30933	30947.1	14	1.092		-88	3H5A - 4	BT9/2	-88 *3H5A	5
31333	31388.3	55	0.983	0.98	-88	BT9/2 + 3	BS9/2	-78 A3D2	93
31434	31454.3	20	1.163		58	3F4B - 26	1G4B	90 *3F4B	3
33838	33726.7	-111	1.125	1.14	86	BT7/2 - 8	BS9/2	81 B3D3	96
34305	34310.3	5	0.963	0.995	-50	3H5B + 46	BS9/2	50 *3H5B	48
34536	34587.9	51	0.986	1.000	43	3H5B + 42	BS9/2	-43 *3H5B	55
35365	35363.7	-1	0.909	0.91	-58	3H4A - 26	3F4A	-97 *3H4A	
38679	38685.6	6	1.032	1.043	-57	3H4B - 25	3F4B	98 *3H4B	
40312	40208.5	-104	1.159	1.18	-98	3F3B + 1	3H4B	98 *3F3B	
43947	44001.3	55	0.920	1.04	-57	1G4A - 32	3H4A	-99 *1G4A	
47324			1.027		-56	1G4B + 34	3H4B	-100 *1G4B	
59510			0.911		99	116B + 1	3H6B	-100 *116B	
MATRICE J=11/2									
22481	22559.5	78	1.141	1.15	79	AT11/2+ 19	3H6A	-68 A3D2	80
22571	22468.0	-103	1.215	1.21	74	3H6A - 18	AT11/2	-74 *3H6A	22
24912	24957.5	45	1.216	1.235	75	AT9/2 + 19	AS11/2	73 A3D3	98
25427	25520.9	94	1.123	1.10	78	AS11/2- 18	AT9/2	-78 A1D2	96
26335	26368.4	33	1.135	1.125	91	3H6B - 3	3H6A	-92 *3H6B	4
30995	31007.6	13	0.992	1.000	96	3H5A + 1	3F4B	-96 *3H5A	
31523	31519.5	-3	1.186		60	3F4B + 29	1G4B	97 *3F4B	
32152	32107.2	-45	1.120	1.115	99	BT9/2		99 B3D3	
34581	34532.9	-48	1.088	1.126	-99	3H5B - 1	3H5A	-99 *3H5B	
38349	38347.0	-2	1.054	1.070	-59	3H4B + 28	3F4B	-100 *3H4B	
47025			1.062		58	1G4B - 32	3H4B	100 *1G4B	
56961			1.065		92	116A - 6	116B	93 *116A	
61008			0.952		93	116B + 6	116A	93 *116B	

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/O				F13DS O/O
					COEUR (F12) LS F13DS JL		(F12) REEL F13DS JJ		

MATRICE J=13/2

22639	22742.7	104	1.221	1.198	90	AT11/2+	10	3H6A	90	A3D3	90	
22900	22902.2	2	1.125	1.138	88	3H6A	-	10	AT11/2	-89	*3H6A	10
26381	26357.6	-23	1.194	1.188	98	3H6B	-	1	116B	99	*3H6B	
33875	33943.3	68	1.103	1.113	100	3H5B				-100	*3H5B	
56973			0.953		-95	116A	+	4	116B	96	*116A	
61205			1.060		-95	116B	-	4	116A	-96	*116B	

MATRICE J=15/2

25529	25536.1	7	1.199	1.20	-99	3H6B	+	1	116B	100	*3H6B	
59709			1.068		99	116B	+	1	3H6B	100	*116B	

Les états propres $|\ast[S_1 L_1] J_1 \rangle$ du coeur réel f^{12} couplés aux deux états j_2 de l'électron p , définissent un couplage intermédiaire très proche du couplage réel, en particulier pour les termes mélangés $\ast^3F_4$ et $\ast^3H_4$.

Le tableau 11 rassemble les résultats. Les deux premières composantes des vecteurs dans les couplages $j_1 L_2$ pour $f^{13}ds$ et $J_1 j_2$ pour $f^{12}s^2p$ apparaissent dans la colonne composition. A titre de comparaison, la plus forte composante des vecteurs avec $f^{13}ds$ en $j_1 J_2$ et $f^{12}s^2p$ en $\ast J_1 j_2$, est indiquée.

La notation des termes $J_1 J_2$ est la même que précédemment. Les lettres, T et S, représentent les états triplet et singulet de la valeur K qui les suit.

Par exemple, $((f^{13}) 5/2, (ds) 2) 0 \frac{1}{2}$ s'écrit B S $\frac{1}{2}$.

La dernière colonne précise la pureté de chaque état dans la configuration $f^{13}ds$. Le mélange de $f^{12}s^2p$ et $f^{13}ds$, est faible en comparaison du mélange de $f^{13}sp$ et $f^{12}ds^2$; il est suffisant, pour expliquer les transitions observées des niveaux de $f^{13}ds$, 22559 11/2 et 22742 13/2, avec ceux du multiplet fondamental ($\ast^3H_6$ 3/2) de $f^{12}ds^2$.

Tous les niveaux de $f^{12}s^2p$ construits sur les termes $\ast^3H_6$, $\ast^3F_4$ et 3H_5 de f^{12} sont connus.

2 - $4f^{12}5d6s6p$.

La dimension de cette configuration, 1229 niveaux, est impressionnante. La pureté de 81 % du coeur f^{12} sur une base pure LS n'autorise pas une troncature satisfaisante du coeur f^{12} . Le calcul complet de cette configuration (AGENAC + ASSAC + DIAGAC) a demandé douze heures d'occupation continue de l'UNIVAC 1108 de la Faculté des Sciences à Orsay. Les rangs K des matrices J sont :

J : 1/2 3/2 5/2 7/2 9/2 11/2 13/2 15/2 17/2 19/2 21/2

K : 88 160 203 212 192 154 109 66 32 11 2

Le couplage de base LS a été choisi en fonction des formules données par les graphes de JUCYS, pour que celles-ci soient les plus simples possibles. En reléguant l'électron 6s en dernière position, par rapport à l'ordre classique $f^{12}ds p$ des électrons, on évite la présence de deux symboles $12 - j$ irréductibles, qui apparaissent dans les formules angulaires des paramètres G_2 et G_4 de l'interaction $Q(f^{12}p)$, et augmentent les temps de calcul.

Le couplage LS de base, finalement choisi, est :

$$((((f^{12}) \bar{S}\bar{L}, d) S_1 L_1, p) S_2 L, s) SL)$$

Les coefficients de parenté fractionnelle de la deuxième demi-couche sont exprimés en fonction de leurs homologues de la première demi-couche, à l'aide de la formule 19 de l'article III de G. RACAH [23]. Ces coefficients sont pris dans les tables de C.W. NIELSON et G.F. KOESTER [42].

Les formules algébriques des coefficients angulaires des intégrales de Slater et des constantes de structure fine ont été calculées avec AGENAC. Le calcul des éléments de matrice de l'interaction spin-orbite des électrons f^{12} (formule 25) a duré 1 h. 28 mn. sur l'UNIVAC 1108. C'est la formule la plus longue, en raison de la base LS choisie, que nous ayons calculée à ce jour.

Les dimensions particulières de cette configuration et les 52 K disponibles de la mémoire centrale de l'UNIVAC 1108, n'ont pas permis l'utilisation de la version standard du programme DIAGAC. Grâce au "processor MAP" de l'UNIVAC 1108, nous avons pu segmenter le programme pour ne conserver, en unité centrale, que le strict minimum nécessaire à une étape du calcul. De cette façon, 50 vecteurs propres ont été calculées par matrice,

au lieu des 26 autorisés initialement par DIAGAC. Le tableau 12 rassemble les temps de diagonalisation des matrices de f^{12} dsp suivant les différentes options des programmes utilisés.

TABLEAU 12 - Diagonalisation de f^{12} dsp.

Programmes	Dimensions		Temps
	vecteurs propres calculés	valeurs propres calculés	
DIAGAC	26	60	11 mn.
DIAMAP	50	60	23 mn. 42 s.
DIAMAP	50	toutes	49 mn. 54 s.

Finalement, 162 niveaux pairs de f^{12} dsp sont identifiés, dont 130 ont servi à optimiser les valeurs des paramètres de la table 4. L'écart $\overline{\Delta E}$, final obtenu, de 100 cm^{-1} représente 0,6 % de l'intervalle d'énergie des niveaux observés. Les niveaux interprétés sont, en grande partie, construits sur le parent ${}^3\text{H}_6$ de f^{12} et le rapport des intégrales E^k du coeur a été fixé aux valeurs obtenues dans $f^{12}\text{ds}^2$ et $f^{12}\text{s}^2\text{p}$.

La pureté des 356 vecteurs propres, calculés sur la base LS de départ, est extrêmement faible; 16 %. En raison de l'ordre élevé de certaines matrices, il est impossible d'effectuer les changements de base qui permettraient d'exprimer les vecteurs propres dans un couplage intermédiaire plus proche du couplage réel. Seul, le couplage intermédiaire $J_1 J_2$ défini par $((f^{12}) [S_1 L_1] J_1, (\text{dsp}) [S_2 L_2] J_2)$ a été étudié pour les matrices de $J \geq 15/2$ de rang inférieur à 100.

Cette transformation partielle des matrices de $J \geq 15/2$ a permis l'interprétation des niveaux profonds comme étant ceux des multiplets $(f^{12}) {}^3\text{H}_6$, $(\text{dsp}) {}^4\text{F}_{3/2, 5/2}$ et $((f^{12}) {}^3\text{H}_6, (\text{dsp}) {}^4\text{D}_{3/2, 5/2})$.

Tableau des paramètres de $4f^{14}5d^15p^1$

Paramètres	Valeurs (cm^{-1})	Ecart-types (cm^{-1})
T	67 112	215
$E^1 (f^{11})$	6 742	44
$E^2 (f^{12})$	32,5	E^2/E^1 fixé
$E^3 (f^{12})$	648	E^3/E^1 fixé
$F_2 (fd)$	176	2
$F_4 (fd)$	12,5	0,8
$G_1 (fd)$	137	6,6
$G_3 (fa)$	11,7	G_3/G_1 fixé
$G_5 (fd)$	2,4	G_5/G_1 fixé
$F_2 (fp)$	61	4
$G_2 (fp)$	7,5	1
$G_4 (fp)$	7,9	1,7
$G_3 (fs)$	150	fixé
$F_2 (dp)$	336	7
$G_1 (dp)$	504	9
$G_3 (dp)$	5	2
$G_2 (ds)$	2 071	67
$G_1 (sp)$	3 211	48
ζ_f	2 644	13
ζ_d	920	21
ζ_p	1 810	38

N : 130

$\overline{\Delta E} = 100 \text{ cm}^{-1}$

La pureté de ce couplage $J_1 J_2$ pour les vecteurs propres des matrices $J \geq 15/2$ est de 47 %.

La comparaison, entre les énergies calculées et observées des niveaux inférieurs à 50000 cm^{-1} est faite dans le tableau 13. Le premier coefficient des vecteurs propres, exprimés sur la base LS de départ, montre la pauvreté de cette approximation pour décrire les fonctions propres de $f^{12} \text{dsp}$.

Malgré les prévisions du calcul paramétrique, il est difficile de mettre en évidence les niveaux manquants de $J > 15/2$, car le nombre de leurs combinaisons possibles avec les niveaux pairs de $f^{12} \text{ds}^2$ est très faible. En outre, les règles de sélection interdisent certaines transitions dans la mesure où les couplages $J_1 J_2$ de $f^{12} \text{dsp}$ et $f^{12} \text{ds}^2$ sont purs.

Par exemple, la transition du niveau $(^3\text{H}_6, ^4\text{F}_{9/2}) J = 17/2$ de $f^{12} \text{dsp}$ au niveau $(^3\text{H}_6, ^2\text{D}_{5/2}) J = 17/2$ de $f^{12} \text{ds}^2$ est doublement interdite :

$$\begin{aligned} & - \text{par la règle } \Delta S_2 = 0 && (\text{transition } ^4\text{F} \rightarrow ^2\text{D}) \\ & \text{et la règle } \Delta J_2 = 0, \pm 1 && (\text{transition } [^4\text{F}] 9/2 \rightarrow [^2\text{D}] 5/2) \end{aligned}$$

Les facteurs de Landé g calculés des niveaux profonds sont en excellent accord avec les valeurs mesurées.

$$3 - 4f^{13} 6s7s \text{ et } 4f^{13} 6s8s.$$

Les huit niveaux de $4f^{13} 6s7s$ et les quatre niveaux profonds de $4f^{13} 6s8s$ sont identifiés. La figure 10 montre clairement que le couplage des deux configurations est encore du type $((l^n)j_1, (l'l'')J_2)$ annoncé par G. RACAH. Les électrons extérieurs $6sns$ possèdent deux états propres, $^3\text{S}_1$ et $^1\text{S}_0$, dont la différence d'énergie est égale à $2G_0$ ($6sns$).

TABLEAU 13 CONFIGURATION 4F12 5D6S6P .

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN D/O COUPLAGE LS	COUPLAGE JJ
MATRICE J=1/2						
40838			0.560		17 (1G2F)3D)4D)	
42452			1.616		30 (3H4F)5D)6D)	
43350			1.000		18 (3H4F)5F)6F)	
44311			0.203		27 (3H4G)5F)6F)	
45603			0.076		20 (3F4F)5F)6F)	
47206			2.245		25 (3H4F)5D)6D)	
48457			1.337		14 (3F4D)5D)6D)	
48577			0.538		10 (3F4F)3D)4D)	
49353			0.787		20 (3F4D)3P)2P)	
49554			0.762		28 (3F4D)5F)6F)	
MATRICE J=3/2						
37008			0.951		15 (3H2F)1D)2D)	
38744			1.027		11 (1G2F)3F)4F)	
40705			1.211		11 (1G2D)3P)4P)	
41596	41743.4	147	0.859	0.913	13 (3H4F)5D)6D)	
41991	42052.3	61	1.013		12 (3F4D)3P)2P)	
42529			1.141		28 (3H4F)5D)6D)	
43273	43230.7	-42	1.012	0.99	8 (3H4G)5F)6F)	
43623			1.059		15 (1G2D)3D)4D)	
44265			0.848		14 (3H4G)5F)6F)	
45084			0.780		10 (3H2F)3F)4F)	
45521			0.633		13 (3H4G)5G)6G)	
45926			0.789		21 (3F4F)5G)6G)	
46708			0.819		13 (3H4G)3F)4F)	
47256			1.294		11 (3F4D)5F)6F)	
47422			1.127		8 (3H4F)5F)6F)	

L CALC.	F OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN D/D COUPLAGE LS	COUPLAGE JJ
47725			0.835		7 (3H4G)5F)6F)	
48540			0.584		15 (3H4F)5G)6G)	
48751			1.412		10 (3F4D)3P)4P)	
48881			0.881		9 (3F4G)5G)6G)	
48835			0.956		10 (1G2F)3D)2D)	
49386			1.121		11 (3F2P)3P)4P)	
49619			0.976		6 (3F4G)3F)4F)	
49732			0.575		11 (3F4F)5G)6G)	
49918			0.962		15 (3F4G)5F)6F)	

MATRICE J=5/2

34097	34194.1	97	1.252	1.24	14 (3H4F)5D)6D)	
37089			1.058		7 (3H4F)3D)4D)	
37873			1.300		7 (3F4D)5D)6D)	
38708	38751.8	43	1.263	1.215	9 (3H4G)3F)4F)	
39227	39386.9	159	0.950	1.084	10 (1G2F)3G)4G)	
40418	40347.2	-71	1.112	1.14	7 (3H4G)5F)6F)	
40849			1.093		11 (3H4F)5G)6G)	
41079	40938.6	-140	1.272	1.20	5 (3F4D)5P)6P)	
41504	41533.6	29	1.016	1.025	14 (3H4F)3D)2D)	
42256	42179.9	-76	1.017	1.05	14 (3H4F)5G)6G)	
42351	42367.6	16	1.229	1.20	9 (3H4F)5D)6D)	
42773	42705.9	-62	1.029	1.095	11 (3H4F)5D)6D)	
42906			1.268		7 (3H2F)3D)4D)	
43142	43113.6	-28	1.147	1.114	14 (3H4F)5F)6F)	
43884			1.162		9 (1G2G)3F)4F)	
44110	44182.3	72	1.051	1.17	11 (3H4G)3F)2F)	
44493	44300.2	-193	1.136	1.090	17 (3H4F)5D)6D)	
44807			0.962		8 (3F4G)5H)6H)	

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN D/D COUPLAGE LS COUPLAGE JJ
44936			0.984		7 (1G2H)3G)4G)
45228			1.011		7 (3H2F)3D)2D)
45542			0.853		8 (3F4F)5G)6G)
45789			1.068		11 (3H2F)1D)2D)
46213			0.899		16 (3H4G)5F)6F)
46478			0.983		7 (3H4H)5H)6H)
46665			0.898		12 (3F4G)5H)6H)
47131			1.143		9 (3F4F)5G)6G)
47509			0.948		6 (3H2F)3G)4G)
47656			0.883		11 (3H4G)5H)6H)
48040			0.981		11 (3F4G)5H)6H)
48142			0.832		10 (3F4G)5G)6G)
48360			1.061		5 (3F4D)5P)6P)
48483			1.023		8 (3H2F)3G)4G)
48725			1.093		5 (3H2F)1D)2D)
49064			1.037		5 (3F4D)5D)4D)
49127			1.006		7 (3H4G)5H)6H)
49147			1.202		13 (3F4D)5P)4P)
49435			0.960		7 (3H4G)5F)4F)
49618			1.096		7 (3F4P)5S)6S)
49845			1.077		4 (1G2D)3D)2D)
49884			1.035		8 (3F4F)5D)6D)

MATRICE J=7/2

31398	31367.7	-31	1.385	1.33	26 (3H4F)5D)6D)
34377	34365.6	-12	1.213	1.205	19 (3H4F)5D)6D)
35741	35682.2	-59	1.141	1.122	18 (3H4F)3F)2F)
36892	36934.2	42	1.290	1.285	8 (3H4G)3F)4F)
37373	37519.5	146	1.099	1.09	8 (3H2F)1G)2G)

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/O	
					COUPLAGE LS	COUPLAGE JJ
38157	38211.6	55	1.146	1.175	7 (3H2F)3F)4F)	
38528	38482.6	-45	1.213	1.25	15 (3H4F)5D)4D)	
39418	39413.7	-4	1.200	1.165	8 (3H4F)5D)4D)	
39526	39480.3	-46	1.099	1.17	14 (3H4G)5F)6F)	
40049	40596.3*		1.340	1.305	22 (3H4F)3D)4D)	
40276	40533.8	257	1.307	1.24	9 (3H4F)3D)4D)	
40788	40763.9	-24	1.065	1.178	7 (3H4F)3F)2F)	
41248	41012.4	-236	1.182	1.15	9 (3H4F)5G)6G)	
41460	41425.5	-35	1.106	1.10	12 (3H4G)5H)6H)	
41728	41525.2	-203	1.102	1.105	7 (3H2H)1G)2G)	
42141	42133.3	-8	1.078	1.17	6 (3H2G)1G)2G)	
42392	42370.7	-22	1.019	1.043	6 (3H2F)3D)4D)	
42853	42742.0	-111	1.231	1.19	11 (3H4F)3F)4F)	
43154	43034.0	-120	1.169	1.15	10 (3H4F)5G)6G)	
43209			1.179		12 (3H2F)3D)4D)	
43460	43428.8	-31	1.135	1.155	7 (3H4F)3F)2F)	
43728			0.958		10 (3H4H)5I)6I)	
43988			1.297		15 (3F4D)5P)6P)	
44255	44263.9	9	1.083	0.905	7 (3H4G)5F)6F)	
44414	44418.4	4	1.154		6 (3F4G)5F)6F)	
44535			1.147		10 (3H4G)3F)2F)	
44758			1.047		7 (3H4K)5I)6I)	
44972			0.917		10 (3H4G)5H)6H)	
45182	45408.7*	227	1.145	1.105	8 (3H2F)1F)2F)	
45412			1.024		6 (3H4F)5F)6F)	
45718			1.050		16 (3H4G)5F)6F)	
45987			0.989		5 (3H2G)1G)2G)	
46019			1.084		9 (3H4G)3F)4F)	

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN D/D COUPLAGE LS COUPLAGE JJ
46693			0.995		8 (3F4H)5I)6I)
46892			1.012		5 (3H2H)3H)4H)
47108			0.999		8 (3F4G)5H)6H)
47412			1.164		19 (3H4G)5F)4F)
47522			0.977		13 (3F4G)5H)6H)
47954			1.034		6 (3H4I)5H)6H)
48061			1.027		9 (3F4G)5G)6G)
48204			1.028		8 (3F4H)5H)6H)
48361			0.976		8 (3F4F)3F)2F)
48362			1.085		6 (3H4H)5G)6G)
48420			1.102		17 (3F4F)5G)6G)
48608			0.945		8 (3F2G)3H)4H)
48736			1.010		6 (3H42)5I)6I)
48855			0.969		7 (3H4I)3H)4H)
49167			1.075		7 (3F4F)5D)6D)
49367			0.992		5 (3H2F)3G)4G)
49548			1.113		10 (3F4D)5F)6F)
49703					
49814					
49869					
49964					

MATRICE J=9/2

29365	29308.7	-56	1.497	1.49	64 (3H4F)5D)6D)
32390	32441.7	51	1.243	1.25	12 (3H4F)5D)6D)
34555	34457.9	-97	1.241	1.186	22 (3H4F)3F)4F)
34990	35054.7	64	1.304	1.28	26 (3H4G)5F)6F)
36246	36377.7	131	1.206	1.21	14 (3H4F)3F)4F)
36988	37010.5	22	1.123	1.11	13 (3H4F)3G)2G)

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/O COUPLAGE LS	COUPLAGE JJ
37773	37768.7	-5	1.230	1.215	19 (3H4F)5F)6F)	
38294	38384.9	91	1.035	1.134	9 (3H2G)1H)2H)	
38499	38499.7	1	1.182	1.064	7 (3H4G)5H)6H)	
39223	39244.6	21	1.073	1.05	10 (3H2I)1H)2H)	
39379	39488.2	109	1.084	1.095	8 (3H4F)5F)4F)	
40117			1.138		9 (3H4H)5G)6G)	
40187	40322.5	135	1.105	1.115	10 (3H4F)5F)4F)	
40517	40517.7	1	1.204	1.153	6 (3F4D)5F)6F)	
40865	40855.6	-10	1.114	1.08	7 (3H4G)3G)2G)	
41201	41109.4	-92	1.171	1.19	10 (3H2F)3G)4G)	
41522	41576.1	53	1.201	1.249	6 (3F4F)5D)6D)	
41764	41786.2	24	1.240	1.25	16 (3H4F)5F)4F)	
42091	41881.7	-209	1.221	1.18	7 (3F4F)5D)6D)	
42547	42770.8	223	1.185	1.215	15 (3H4G)5F)4F)	
42615	42561.5	-53	1.065	1.06	10 (3H4H)5I)6I)	
42774	42594.0	-180	1.100	1.09	9 (3F4G)3G)2G)	
42916	42839.5	-76	1.022	1.086	10 (1G2I)3I)4I)	
43386	43030.3*	-356	1.130	1.143	8 (3F4D)5D)6D)	
43612	43544.6	-68	1.196		7 (3H2F)3F)4F)	
43640	43675.3	35	1.075	1.04	6 (3H4F)5F)4F)	
44168			1.188		8 (1G2H)3G)4G)	
44197			1.275		44 (3H2G)3F)4F)	
44369			1.091		8 (3H4F)3G)4G)	
44464			1.235		9 (3F4P)5D)6D)	
44516	44774.2*	258	0.996		13 (3H4K)5I)6I)	
44707	44868.2*	161	1.105	1.10	9 (3H4F)5G)6G)	
45103	45070.6*	-32	1.091		16 (3H4G)3G)2G)	
45212	45147.3*	-65	1.111		12 (3H2F)3F)4F)	

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN D/O COUPLAGE LS COUPLAGE JJ
45350			1.114		9 (3H2H)3G)2G)
45584			1.137		6 (3F4D)5D)6D)
45913			1.023		8 (3H4I)3H)2H)
46037			1.051		8 (3H2H)3I)4I)
46250			1.125		8 (3H4F)5F)4F)
46383			0.959		16 (3H4I)5K)6K)
46790			1.079		6 (3H2F)1G)2G)
46950			1.087		8 (3H2H)1G)2G)
47183			1.042		7 (3H2G)1G)2G)
47436			1.040		6 (3F4G)5H)6H)
47711			0.956		10 (3H4I)5K)6K)
47860			0.908		13 (3H4K)5K)6K)
48008			1.089		5 (3H2G)1G)2G)
48157			1.100		11 (3H4H)5G)6G)
48321			1.095		7 (3F4G)5H)6H)
48370			1.078		7 (3F4H)5I)6I)
48589					
48664					
49223					
49348					
49374					
49529					
49592					
49716					
49798					
49820					

MATRICE J=11/2

31124	31080.8	-44	1.372	1.37	34 (3H4F)5F)6F)
-------	---------	-----	-------	------	-----------------

E CALC.	E OBS.	Δ E	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/O COUPLAGE LS COUPLAGE JJ
33534	33638.7	104	1.402	1.42	59 (3H4G)5F)6F)
33905	33793.2	-112	1.251	1.24	30 (3H4F)5F)6F)
34806	34491.8	-114	1.182	1.16	17 (3H4F)3G)4G)
36267	36329.8	63	1.026	1.035	9 (3H2K)1I)2I)
36609	36656.7	48	1.154	1.16	9 (3H4G)5G)6G)
37273	37276.8	4	1.252	1.25	15 (3H2H)3G)4G)
37689	37657.9	-31	1.014	1.01	10 (3H4G)3H)2H)
38115	38161.2	46	1.115	1.125	11 (3H4F)5G)6G)
38564	38529.7	-34	1.178	1.17	15 (3H4G)5G)6G)
38980	38877.2	-103	1.065	1.065	6 (3H4G)3H)2H)
39478	39563.0	85	1.069	1.11	8 (3H4K)5L)6L)
39745	39709.0	-36	1.217	1.17	20 (3H4H)5G)6G)
40455	40376.2	-79	1.130		6 (3H2H)3H)4H)
40561	40663.1	102	0.964		13 (3H2I)1I)2I)
40967	41081.4	114	1.224	1.295	18 (3H4F)5G)4G)
41404	41569.1	165	1.196	1.205	13 (3F4G)5F)6F)
41586	41687.4	101	1.211	1.145	12 (3H4F)5G)4G)
41802	41874.4	72	1.089	1.16	3 (3F4H)3H)2H)
42171	42119.1	-52	1.152	1.10	11 (3F4G)3G)4G)
42391	42541.4	150	0.999	1.10	8 (3F4H)3H)2H)
42597	42581.9	-15	1.194	1.135	16 (3H4F)3G)4G)
42955	42961.9	7	1.189	1.205	7 (3H2F)3G)4G)
43164	43186.3	22	1.127	1.196	5 (3F2H)3G)4G)
43349	43408.9	60	1.174	1.20	11 (3F4D)5F)6F)
43647	43447.9*	-200	1.159	1.105	7 (3H4I)3H)2H)
43754	43974.6*	221	1.139	1.14	7 (1G2I)3I)4I)
43852			0.988		16 (3H4I)5K)6K)
44313	44383.6*	-71	1.085		13 (3H4K)5I)6I)

E CALC.	E OBS.	Δ E	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/O COUPLAGE LS COUPLAGE JJ
44453			1.245		14 (3F4F)5F)6F)
44541			1.143		7 (3H4G)5G)6G)
44793	44747.0*	-46	1.124	1.17	16 (3H4G)3G)4G)
45047	45058.4*	11	0.815	1.055	31 (3H4K)5L)6L)
45278	45288.9*	11	1.116	1.155	13 (3H4H)5I)6I)
45470	45485.9*	16	1.169		10 (1G2I)3H)4H)
45856	45635.7*	-220	1.152	1.14	16 (3H4G)5G)4G)
45991	45810.5*	-180	1.118	1.225	7 (3H4G)3H)4H)
46090	46163.6*	74	1.178		9 (3H4G)3H)4H)
46304			1.199		13 (3F4D)5F)6F)
46393			0.995		11 (3H4K)3I)4I)
46896			1.084		6 (3H4H)5G)6G)
46999			1.131		7 (3H4H)5G)6G)
47167			1.124		11 (3H2G)3H)2H)
47432	47484.8*	53	1.079	1.115	15 (3H2H)3H)2H)
47746			1.197		12 (3H4H)5G)4G)
47851			1.088		10 (3F4G)5H)4H)
48060			1.086		7 (3H4I)5I)6I)
48324			1.041		9 (3F4H)5H)6H)
48404			1.153		10 (3H2G)3G)4G)
48568			1.088		5 (3H4I)5I)6I)
48835					
48943					
49087					
49224					
49545					
49755					
49944					

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/O COUPLAGE LS COUPLAGE JJ
MATRICE J=13/2					
33039	32950.0	-89	1.317	1.31	30 (3H4F)5G)6G)
33885	33812.1	-73	1.094	1.15	13 (3H4F)5G)6G)
34513	34449.8	-63	1.237	1.18	31 (3H4F)5G)6G)
35760			1.084		8 (3H4H)5G)6G)
36101	35958.9	-142	1.127	1.134	13 (3H2K)1K)2K)
36373	36223.6	-150	1.149	1.12	16 (3H4G)5G)6G)
37354	37365.1	11	1.189	1.20	17 (3H4G)5G)6G)
37761	37646.2	-115	1.163	1.175	13 (3H4G)3H)4H)
38114	38012.8	-101	1.120	1.09	14 (3H4K)3I)4I)
38521	38588.5	68	1.236	1.212	16 (3H4G)5H)6H)
39001	38915.9	-85	1.252	1.225	28 (3H4H)5G)6G)
39474	39434.1	-40	1.128	1.15	8 (3F4G)5H)6H)
40108	40113.7	6	0.882		31 (3H4K)5L)6L)
40463			1.193		15 (3H4I)5H)6H)
40745	40780.9	36	1.204	1.22	15 (3F4G)5H)6H)
41351	41274.9	-76	1.111	1.12	14 (1G2I)3K)4K)
41777	41917.2	140	1.155	1.15	18 (3F4H)3H)4H)
42335	42406.7	72	1.130	1.125	12 (3H4K)5K)6K)
42806			1.215		20 (3F4G)5G)6G)
43025	42910.0	-115	1.190	1.20	12 (3F4F)5G)6G)
43170	43288.7	119	1.168	1.175	13 (3F4F)5G)6G)
43448	43438.2	-10	1.167	1.23	11 (3F4F)5G)6G)
43841	43979.3	138	1.148		11 (3H4K)5K)6K)
44014	44072.6	58	1.116		9 (3H4G)5H)4H)
44031			1.192		30 (3H4G)5H)4H)
44427	44307.2	-120	1.096	1.13	9 (3H2K)3I)2I)
44617	44591.1	-26	1.061	1.04	23 (3H4I)5K)6K)

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/D COUPLAGE LS	COUPLAGE JJ
45091	44803.9*	-288	1.036	1.105	18 (3H4K)3K)4K)	
45345	45389.1*	44	1.171		9 (3F4G)5G)6G)	
45663	45660.6*	-2	1.170	1.19	9 (3F4H)5G)6G)	
45804			1.131		15 (3H4I)3I)2I)	
46023			1.001		18 (3H4K)5L)6L)	
46168			1.124		8 (3H4I)5H)4H)	
46520	46597.7*	78	1.173	1.18	14 (3H4H)5H)4H)	
46724	46694.1*	-30	1.163		20 (3H4H)5I)6I)	
47065	47027.4*	38	1.182	1.17	11 (3H4H)3H)4H)	
47141	47214.3*	73	1.131	1.135	16 (3H4I)3H)4H)	
47560	47644.9*	84	1.130	1.175	9 (3H2G)3H)4H)	
47723	47759.4*	36	1.064	1.16	11 (1G2I)3K)2K)	
48376	48115.6*	-261	1.120	1.17	7 (3F4H)5H)6H)	
48520			1.169		18 (3H4I)5H)4H)	
48681			1.164		9 (3H2H)3H)4H)	
49004			1.143		8 (3F4H)5H)6H)	
49096			1.104		14 (3H4I)5I)6I)	
49449			1.139		12 (3F4G)5H)4H)	
49731			1.125		7 (3F2G)3H)4H)	
49890			1.109		11 (3F4G)5H)4H)	

MATRICE J=15/2

32064	32112.9	49	0.981	0.98	24 (3H2K)1L)2L)	80 3H6 4F3/2
33925	34046.5	121	1.177	1.18	20 (3H4K)5I)6I)	46 3H6 4F5/2
35476	35557.7	82	1.266	1.255	45 (3H4G)5H)6H)	35 3H6 4D3/2
36143	36179.6	36	1.148	1.155	17 (3H2K)3K)4K)	47 3H6 4D5/2
36279	36273.9	-5	1.147	1.13	14 (3H4I)5K)6K)	29 3H6 4F7/2
36670	36653.9	-16	1.105	1.13	30 (3H4K)3K)2K)	59 3H6 2D3/2
37361	37159.5	-202	1.241	1.225	25 (3H4I)5H)6H)	32 3H6 2D5/2

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION FN COUPLAGE LS	O/O COUPLAGE JJ
37867	37858.6	-9	1.205	1.20	13 (3H4K)5I)6I)	53 3H6 4D7/2
38436	38485.9	50	1.203	1.145	17 (3H4H)5I)6I)	45 3H6 4F9/2
39872			1.269		23 (3H4H)5H)6H)	39 3H6 4P3/2
40321			1.209		16 (3H4I)5I)6I)	30 3H6 4P5/2
41006			1.034		45 (3H4K)5L)6L)	67 3H5 4F5/2
41862			1.210		23 (3F4G)5H)6H)	28 3F4 4F7/2
42282			1.158		13 (3H4K)5I)4I)	30 3H6*2D3/2
42899	42855.4	-44	1.184	1.124	27 (3F4G)5H)6H)	29 3F4 4F9/2
43145	43051.5	-94	1.129	1.19	10 (3H4I)3K)2K)	30 3H6*2F5/2
43850	43614.3	-236	1.146	1.12	29 (3H4K)5K)6K)	38 3H5 4F7/2
44107	44210.4	103	1.156	1.15	14 (3H4K)3K)2K)	40 3H5 2D5/2
44421			1.202		25 (3F4H)5H)6H)	24 3F4 4D7/2
44460	44565.8	105	1.122	1.135	28 (3H2K)3K)2K)	32 3H6*2D3/2
45318			1.166		31 (3H4K)5I)4I)	30 3H6*2D5/2
45484	45557.7	73	1.129	1.164	19 (3H4I)3K)2K)	26 3H6 2F5/2
45621	45608.8	-12	1.141	1.15	26 (3H4I)5K)6K)	34 3H5 4D5/2
45964	45934.5	-30	1.163	1.165	13 (3H4K)5I)6I)	29 3H5 4D7/2
46588	46461.0	-127	1.165	1.18	19 (3H4I)3I)4I)	29 3H6 2F7/2
47310			1.192		32 (3H4H)5I)6I)	46 3H5 4F9/2
47409	47630.5*	220	1.132	1.16	29 (3H4H)5I)4I)	31 3H5*2F5/2
47715	47886.0*	171	1.089	1.15	18 (3F4H)5I)6I)	49 3H4 4F7/2
48747			1.121		27 (3H4I)5I)4I)	30 3H6*2P3/2
48813			1.090		26 (3H4I)5I)4I)	29 3H6 2F7/2
49450			1.166		21 (3H4I)5I)6I)	43 3H5 4P5/2

MATRICE J=17/2

32630	32761.5	131	1.107	1.11	30 (3H4K)5L)6L)	80 3H6 4F5/2
34845			1.250		53 (3H4K)5I)6I)	35 3H6 4D5/2
35642	35633.0	-9	1.168	1.18	33 (3H2K)3K)4K)	59 3H6 2D5/

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN COUPLAGE LS	O/D COUPLAGE JJ
36933			1.214		29 (3H4I)5K)6K)	44 3H6 4P5/2
37129	37252.0	123	1.218	1.20	26 (3H4K)5I)6I)	27 3H6 4D7/2
38748			1.247		49 (3H4H)5I)6I)	50 3H6 4F9/2
40190			1.177		38 (3H4I)5I)6I)	30 3H6*2F5/2
40699			1.171		28 (3H4I)5I)6I)	30 3H6*2F5/2
42449			1.116		51 (3H4K)5L)6L)	84 3H5 4F7/2
43113			1.075		38 (3H2K)3L)2L)	51 3H6 2F5/2
43635			1.201		30 (3F4H)5I)6I)	30 3F4 4F9/2
44458	44571.8	114	1.174	1.18	43 (3H4K)5K)4K)	27 3H6 2F7/2
45337			1.188		35 (3H4K)5K)6K)	62 3H5 4D7/2
45703			1.170		24 (3H4K)5K)4K)	38 3H6*2D5/2
46768	46767.7	-1	1.160	1.17	58 (3H4I)5K)4K)	61 3H6*2F7/2
47312			1.194		35 (3H4I)5K)6K)	58 3H5 4F9/2
49582			1.159		32 (3F4H)5I)6I)	55 3H4 4F9/2

MATRICE J=19/2

33695			1.183		59 (3H4K)5L)6L)	90 3H6 4F7/2
36401			1.249		86 (3H4K)5K)6K)	63 3H6 4D7/2
38218			1.247		84 (3H4I)5K)6K)	61 3H6 4F9/2
41952			1.161		38 (3H4K)5L)4L)	66 3H6 2F7/2
43684			1.159		50 (3H4K)3L)4L)	91 3H6*2F7/2
44203	44334.6	131	1.178	1.18	36 (3H4K)5L)6L)	98 3H5 4F9/2

MATRICE J=21/2

35010			1.237		99 (3H4K)5L)6L)	99 3H6 4F9/2
-------	--	--	-------	--	-----------------	--------------

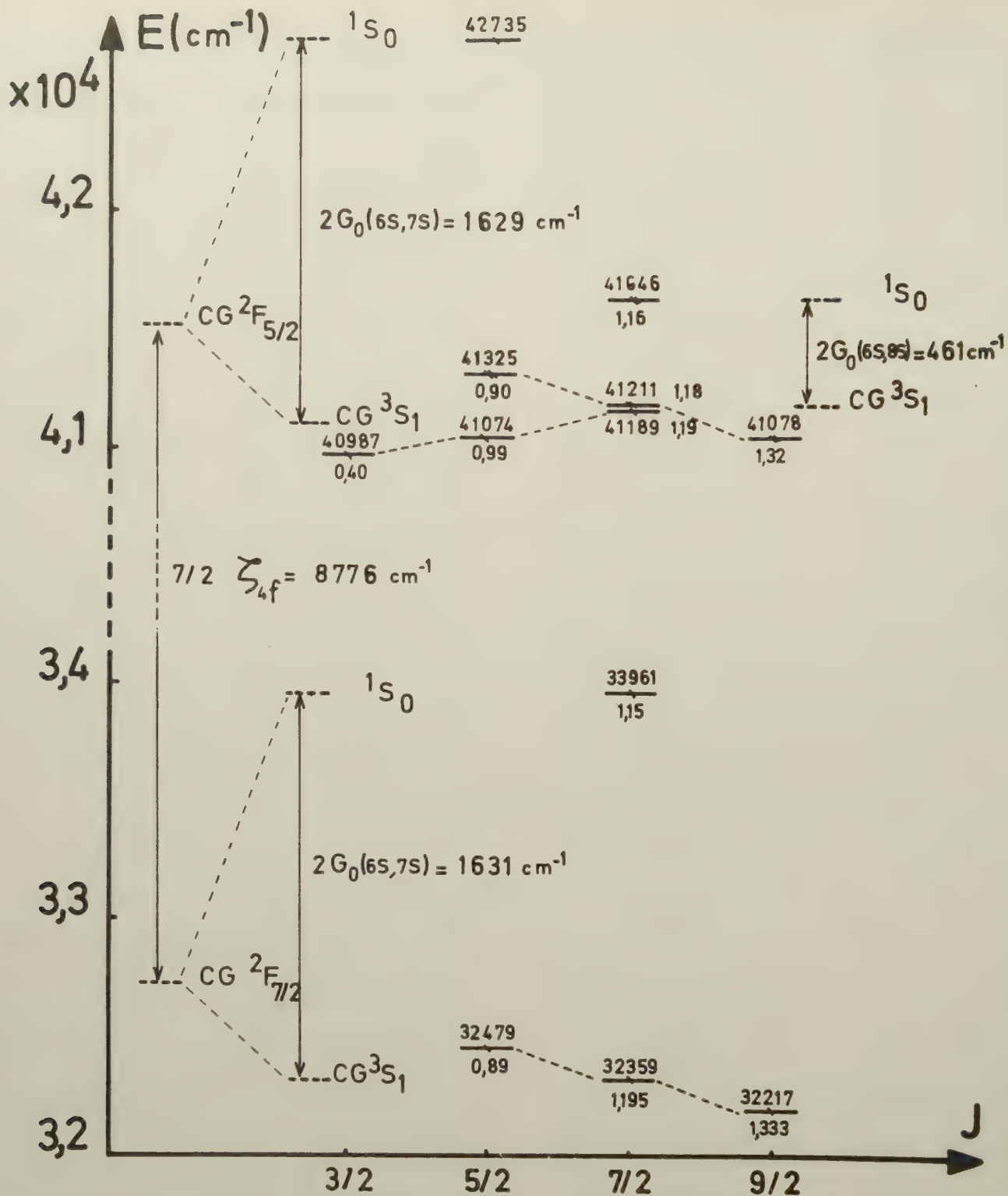


fig. 10

- Niveaux observés de $4f^{13}6s7s$ et $4f^{13}6s8s$ -

Ces deux états couplés successivement aux parents ${}^2F_{7/2}$ et ${}^2F_{5/2}$ de f^{13} , forment deux groupes de 4 niveaux distants de $7/2 \zeta_f$. La position du niveau $J = 9/2$ du terme $((f^{13}) {}^2F_{7/2}, (6sns) {}^3S_1)$ par rapport au centre de gravité des niveaux construits sur le parent ${}^2F_{7/2}$ est donnée par la relation suivante :

$$CG((f^{13}) {}^2F_{7/2}, 6sns) = E((f^{13}) {}^2F_{7/2}, (6sns) {}^3S_1, 9/2) + \frac{1}{2} G_0(6sns) + \frac{1}{2} G_3(4f, 6s) + \frac{1}{2} G_3(4f, ns).$$

En partant de la valeur de $G_3(4f, 6s)$ déterminée par Y. BORDARIER [38] et de cette équation, nous avons calculé les intégrales $G_3(4f, 7s)$ et $G_3(4f, 8s)$.

La table suivante, rassemble les valeurs des paramètres déterminées à partir de ces relations.

TABLE 5 - Paramètres de $4f^{13}6s7s$ et $4f^{13}6s8s$.

Paramètres	Valeurs (cm^{-1})
$G_3(4f, 6s)$	192
$G_3(4f, 7s)$	41
$G_3(4f, 8s)$	20
$G_0(6s, 7s)$	814
$G_0(6s, 8s)$	230
$\zeta_{4f}(f^{13}6s7s)$	2507

La règle de sélection $\Delta j_1 = 0$:



qui dicte l'intensité des transitions entre les niveaux construits sur les termes parents 2F de deux configurations possédant un coeur f^{13} , est violée pour le niveau 41189 $7/2$ de $((f^{13}) \ ^2F_{5/2}, (6s7s) \ ^3S_1)$. Seule la perturbation provoquée par le niveau 41211 $7/2$ de $((f^{13}) \ ^2F_{7/2}, (6s8s) \ ^1S_0)$ permet d'expliquer l'intensité des transitions observées entre le terme $((f^{13}) \ ^2F_{5/2} (6s7s) \ ^3S_1) J = 7/2$ et les niveaux de $((f^{13}) \ ^2F_{7/2}, 6s6p)$.

Le niveau 41646 $7/2$ est interprété avec le terme $((f^{13}) \ ^2F_{7/2}, (6s8s) \ ^1S_0)$. Il a été choisi, de préférence aux niveaux 41425 et 41525 $7/2$, car ses transitions avec $((f^{13}) \ ^2F_{7/2}, 6s6p)$ possèdent le caractère diffus spécifique aux sauts électroniques $6p - ns$. Les trois niveaux sont probablement mélangés car l'intégrale $G_0(6s8s)$ est trop grande devant la valeur de 165 cm^{-1} déterminée par S. NIR [43] dans la configuration $f^{14}6s8s$ de Yb I.

4 - $4f^{13}6s6d$.

La configuration $4f^{13}6s6d$ est le deuxième terme, n égal à 6, de la série des configurations $4f^{13}6snd$. La structure de ses niveaux, comparable à celle de $f^{13}5d6s$, est très tassée car l'interaction électrostatique et spin-orbite de l'électron extérieur $6d$ est très faible devant celles des électrons $4f$ et $6s$. Les 20 niveaux du parent $^2F_{7/2}$ sont identifiés; les autres, construits sur $^2F_{5/2}$ et situés à 8771 cm^{-1} plus haut, sont trop élevés pour être observés.

TABLE 6 - Paramètres de $4f^{13}6s6d$.

Paramètres	Valeurs (cm^{-1})	Ecart-types (cm^{-1})
T	43194	10
F_2 (fd)	13,5	0,6
F_4 (fd)	1,0	0,2
G_1 (fd)	15,2	0,7
G_3 (fd)	1,8	0,4
G_5 (fd)	0,24	0,11
G_3 (fs)	187	16
G_2 (sd)	48	11
ζ_f	2500	fixé
ζ_d	59	7
N = 20		$\overline{\Delta E} = 23 \text{ cm}^{-1}$

TABLEAU 14 CONFIGURATION 4F13 6S6D .

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN O/O		COUPLAGE JJ	
					COUPLAGE JL			
MATRICE J=1/2								
39734	39737.6	4	0.795	0.81	100 AT3/2		100 A303	
47702			2.324		91 BT1/2 + 6 BT3/2		91 B303 + 5 B302	
47992			0.442		-60 BS1/2 + 40 BT3/2		60 B102 - 32 B302	
48130			0.440		54 BT3/2 + 37 AS1/2		-62 B302 + 37 B102	
MATRICE J=3/2								
39091	39061.8	-29	1.343	1.34	57 AS3/2 + 40 AT3/2		57 A102 - 28 A302	
39417	39419.9	2	0.899	0.916	-86 AT5/2 + 12 AS3/2		67 A302 + 21 A303	
39606	39602.9	-3	1.305	1.30	57 AT3/2 - 31 AS3/2		64 A303 - 31 A102	
47895			1.278		-53 BT3/2 + 34 BT1/2		-63 B303 + 22 B302	
47967			0.734		62 BT5/2 - 22 BS3/2		33 B303 - 29 B301	
48145			1.022		-31 BT1/2 - 26 BS3/2		-61 B302 - 26 B102	
48283			1.018		-44 BS3/2 + 28 BT3/2		54 B301 - 44 B102	
MATRICE J=5/2								
38840	38861.9	22	1.556	1.565	96 AT3/2 + 4 AT5/2		57 A301 + 34 A302	
39301	39277.1	-24	1.214	1.184	68 AT5/2 - 20 AS5/2		-37 A303 + 27 A301	
39441	39470.5	29	1.109	1.04	70 AS5/2 - 21 AT7/2		70 A102 - 16 A302	
39651	39658.9	7	0.946	0.96	72 AT7/2 - 19 AT5/2		54 A303 - 35 A302	
48021			1.220		80 BT3/2 + 14 BS5/2		56 B302 + 24 B303	
48115			0.897		-44 BT7/2 - 43 BT5/2		67 B303 - 26 B302	
48155			0.835		-55 BT5/2 + 40 BT7/2		90 B301 + 7 B303	
48324			0.908		-80 BS5/2 + 11 BT7/2		80 B102 + 18 B302	
MATRICE J=7/2								
39193	39187.5	-5	1.352	1.336	76 AT5/2 - 21 AT7/2		-49 A301 + 43 A302	
39470	39462.8	-7	1.116	1.12	-40 AT7/2 - 36 AT9/2		-38 A301 - 31 A303	
39546	39542.2	-4	1.080	1.06	81 AS7/2 - 18 AT9/2		81 A102 - 10 A301	
39633	39628.0	-5	1.036	1.04	-45 AT9/2 + 39 AT7/2		59 A303 - 27 A302	

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN D/O COUPLAGE JL COUPLAGE JJ	
47776			0.686		-99 BT9/2 + 1 BS7/2	74 B301 + 23 B302
48220			1.059		60 BT7/2 - 30 BT5/2	-81 B303 + 10 B102
48277			1.086		52 BT5/2 + 40 BT7/2	66 B302 - 21 B301
48401			0.966		-81 BS7/2 + 17 BT5/2	81 B102 + 13 B303

MATRICE J=9/2

39228	39220.0	-8	0.993	1.12	78 AT11/2 + 13 AT9/2	97 A301 + 2 A303
39307	39322.0	15	1.220	1.153	67 AT7/2 - 18 AT11/2	84 A302 + 13 A303
39468	39444.3	-24	1.149	1.13	38 AS9/2 + 37 AT9/2	-59 A303 - 38 A102
39714	39741.9	28	1.113	1.112	58 AS9/2 - 39 AT9/2	-58 A102 + 27 A303
47930			0.964		-99 BT9/2 + 1 BS9/2	-82 B302 + 17 B303
48046			0.930		96 BS9/2 - 3 BT7/2	96 B102 - 4 B303
48376			1.147		96 BT7/2 + 3 BS9/2	78 B303 + 18 B302

MATRICE J=11/2

39085	39089.5	4	1.115	1.09	65 AT11/2 + 32 AS11/2	-64 A302 - 32 A102
39372	39362.6	-9	1.116	1.13	66 AS11/2 - 24 AT11/2	-66 A102 + 34 A302
39491	39479.9	-11	1.241	1.21	87 AT9/2 - 11 AT11/2	95 A303 - 3 A102
48108			1.117		100 BT9/2	100 B303

MATRICE J=13/2

39130	39157.6	27	1.231	1.24	100 AT11/2	100 A303
-------	---------	----	-------	------	------------	----------

La pureté des vecteurs propres, exprimés dans les couplages intermédiaires $j_1 J_2$ et $j_1 L_2$ définis pour $f^{13}5d6s$, est la suivante :

Couplage :	LS	$j_1 J_2$	$j_1 L_2$
	$((f^{13})^2_F, d) S_1 L_1, s) S L_1)$	$((f^{13})_{j_1}, (ds) [S_2 L_2] J_2)$	$((f^{13})_{j_1}, (ds) L_2) S_2 K)$
Pureté :	54 %	70 %	70 %

L'état quadratique $\overline{\Delta E}$ obtenu, avec les paramètres de la table 6, est de 23 cm^{-1} . Il représente 2,6 % de l'intervalle des niveaux d'énergie observés.

Le tableau 14 rassemble les résultats de l'étude paramétrique. Les deux premières composantes des vecteurs en couplage $j_1 J_2$ et $j_1 L_2$, sont indiquées à l'aide de la notation définie pour $f^{13}5d6s$.

Les niveaux $((f^{13})^2_{F_{7/2}}, (6s6d)^3D)$ donnent des transitions très fortes (intensité 2000 dans la liste de J. SUGAR) avec les niveaux pairs $((f^{13})^2_{F_{7/2}}, (6s6p)^3P)$. La règle de sélection, $\Delta S_2 = 0$, est respectée pour les intensités des transitions de $((f^{13})_{j_1}, (6s6d) [S_2 L_2] J_2)$.

$$5 - 4f^{13}6p^2.$$

Le calcul théorique de $f^{13}p^2$ a permis d'identifier quelques niveaux élevés dont les transitions avec $f^{13}sp$ sont assez fortes. Les niveaux des multiplets, notés $(7/2, ^3P_0)$, $(7/2, ^3P_1)$ et $(7/2, ^3P_2)$ en couplage $((f^{13})_{j_1}, (6p^2) [S_2 L_2] J_2)$, ont tous été observés.

Au total 11 niveaux sur les 15 possibles, construits à partir du parent $^2F_{7/2}$ de f^{13} sont interprétés avec un écart $\overline{\Delta E}$ de 76 cm^{-1} . Le jeu de paramètres est celui de la table 7.

TABLE 7 - Paramètres de $4f^{13}6p^2$.

Paramètres	Valeurs (cm^{-1})	Ecart-types (cm^{-1})
T	51386	395
F_2 (fp)	42	6
G_2 (fp)	7,5	1,4
G_4 (fp)	3	G_4/G_2 fixé
F_2 (p^2)	296	26
ζ_f	2480	fixé
ζ_p	1478	41
N = 11		$\overline{\Delta E} = 76 \text{ cm}^{-1}$

Le couplage $j_1 J_2$, le plus proche du couplage réel, possède une pureté de 74 % contre 58 % au couplage LS de départ.

Les résultats sont comparés dans le tableau 15.

Les écarts entre les facteurs de Landé mesurés et observés de plusieurs niveaux, sont grands devant ceux des niveaux plus profonds étudiés précédemment. Cela résulte de la position très élevée des niveaux de $f^{13}p^2$ et de la négligence dans le traitement paramétrique des interactions avec les configurations voisines.

TABLEAU 15 CONFIGURATION 4F13 6P2 .

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ O/O
MATRICE J=1/2					
52688			0.059		91 B3P2 - 9 B1D2
56365			0.608		91 B1D2 + 9 B3P2
MATRICE J=3/2					
44436	44483.4	47	0.908	1.005	90 A3P2 + 10 A1D2
47508			1.200		90 A1D2 - 9 A3P2
52189			0.881		83 B3P1 - 16 B3P2
53151			0.665		68 B3P2 + 16 B3P1 + 15 B1D2
55695			0.879		84 B1D2 - 15 B3P2
MATRICE J=5/2					
43456	43430.7	-26	1.234	1.10	-66 A3P1 + 27 A3P2 + 7 A1D2
44898	44855.2	-39	0.957	1.045	43 A3P2 + 33 A3P1 + 23 A1D2
47011			1.120		-69 A1D2 + 30 A3P2
50786			0.827		-85 B3P0 - 9 B1S0 - 3 B3P2
51888			1.000		-98 B3P1 + 1 B3P2
53264			0.981		54 B3P2 + 38 B1D2 - 7 B3P0
54884			0.963		-53 B1D2 + 41 B3P2 - 5 B1S0
58242			0.861		86 B1S0 - 8 B3P0 - 6 B1D2
MATRICE J=7/2					
41903	41846.6	-62	1.176	1.21	85 A3P0 + 9 A1S0 - 3 A3P2
43097	43052.5	-45	1.159	1.055	-98 A3P1 - 1 A3P2
44326	44456.2	130	1.149		49 A1D2 - 44 A3P2 - 5 A3P0
46390			1.156		49 A3P2 + 42 A1D2 + 7 A1S0
49635			1.138		82 A1S0 - 8 A3P0 - 7 A1D2
52131			0.972		-77 B3P1 + 16 B3P2 + 7 B1D2
53295			1.060		48 B1D2 + 30 B3P2 + 20 B3P1
55098			1.047		53 B3P2 - 44 B1D2 + 2 B3P1

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ O/O
MATRICE J=9/2					
43393	43429.3	36	1.178	1.20	-91 A3P1 + 7 A3P2
44308	44316.7	8	1.213	1.15	46 A3P2 + 46 A1D2 + 8 A3P1
46286	46221.4	-65	1.183		52 A1D2 - 46 A3P2
52902			1.098		80 B3P2 - 20 B1D2
55534			0.964		80 B1D2 + 20 B3P2
MATRICE J=11/2					
44141	44180.9	39	1.240	1.175	82 A3P2 + 18 A1D2
46868	46850.4	-18	1.124	1.145	82 A1D2 - 18 A3P2

6 - Liste des niveaux impairs

La liste 2 récapitule les noms, énergies et facteurs de Landé g observés des 281 niveaux impairs de Tm I. Les niveaux sont groupés dans la liste par multiplets, en respectant les désignations des couplages intermédiaires étudiés dans les paragraphes précédents.

Le schéma en énergie des niveaux appartenant aux configurations $f^{13}5d6s$, $f^{12}6s^26p$, $f^{13}6s7s$, $f^{13}6s8s$, $f^{13}6s6d$ et $f^{13}6p^2$, est représenté sur la figure 11.

Pour alléger la présentation, les niveaux très denses de la configuration $f^{12}dsp$ sont portés sur la figure 12. La colonne de droite de cette figure rassemble les énergies de quelques niveaux expérimentaux non-identifiés; ceux-ci peuvent appartenir, soit à $f^{13}d^2$, soit à $f^{12}d^2p$. Leur nombre est d'ailleurs trop restreint, pour justifier une étude paramétrique de ces deux configurations élevées.

II - 5 - INTENSITES DES RAIES ET DUREES DE VIE DES NIVEAUX

Afin de vérifier la qualité des fonctions propres obtenues en couplage intermédiaire et devant l'abondance croissante des mesures de force d'oscillateur et de durée de vie, nous avons calculé les forces de raies entre les configurations profondes de Tm I.

La force de raie $S_{JJ'}$, entre deux états atomiques $|\alpha J\rangle$ et $|\alpha' J'\rangle$, est la grandeur fondamentale à calculer; elle dépend simultanément des parties radiales et angulaires des fonctions d'onde. Dans la méthode empirique de G. RACAH, que nous avons utilisée pour la classification des spectres de Tm, les intégrales de Slater et les constantes de couplage spin-orbite sont traitées comme des paramètres ajustables aux résultats expérimentaux pour mieux connaître les propriétés angulaires des fonctions d'onde. En revanche, la partie radiale de ces mêmes fonctions

LISTE 2 NIVEAUX IMPAIRS DE TM₁.

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F13	6S2	2F	7/2 0.00	1.143
			5/2 8771.25	0.855
4F13(2F7/2)	5D6S (3D)	3(3/2)	5/2 20406.87	1.58
			3/2 21799.41	1.45
			1/2 24160.63	1.010
" "	" "	3(11/2)	9/2 22419.76	0.934
			11/2 22559.51	1.15
			13/2 22742.78	1.198
4F12(*3H6)	6S2 6P	(6, 1/2)	11/2 22468.04	1.21
			13/2 22902.13	1.138
4F13(2F7/2)	5D6S (3D)	3(5/2)	7/2 23335.13	1.362
			5/2 23431.87	1.22
			3/2 23574.44	0.83
" "	" "	3(7/2)	9/2 23941.08	1.29
			7/2 24708.07	1.08
			5/2 24611.32	0.92
" "	" "	3(9/2)	7/2 24246.44	1.02
			9/2 24701.07	1.145
			11/2 24957.47	1.235
4F13(2F7/2)	5D6S (1D)	1(3/2)	3/2 25207.75	1.365
		1(11/2)	11/2 25520.99	1.10
		1(5/2)	5/2 26448.28	1.14
		1(7/2)	7/2 27037.49	1.11
		1(9/2)	9/2 27440.87	
4F12(*3H6)	6S2 6P	(6, 3/2)	15/2 25536.10	1.20
			9/2 25699.73	1.12
			13/2 26357.73	1.188
			11/2 26368.41	1.125
4F12(*3F4)	6S2 6P	(4, 1/2)	7/2 28340.28	
			9/2 28514.42	1.085
4F12(3H5)	6S2 6P	(5, 1/2)	9/2 30947.18	
			11/2 31007.59	1.00
4F12(3H6)	5D6S6P(4F)	(6, 3/2)	9/2 29308.70	1.49
			11/2 31080.85	1.37
			15/2 32112.98	0.98
			13/2 32950.05	1.31
4F13(2F5/2)	5D6S (3D)	3(9/2)	7/2 30921.55	0.69
			9/2 31388.30	0.98
			11/2 32107.26	1.115

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F12(3H6) 5D6S6P(4F)	(6,5/2)	7/2	31367.73	1.33
		9/2	32441.71	1.25
		17/2	32761.53	1.11
		11/2	33793.16	1.24
		15/2	34046.52	1.18
		13/2	34449.76	1.18
4F12(*3F4) 6S2 6P	(4,3/2)	9/2	31454.30	
		11/2	31519.49	
		5/2	31593.71	
		7/2	31694.74	1.17
4F13(2F5/2) 5D6S (3D)	3(1/2)	3/2	31499.07	1.33
" "	3(3/2)	5/2	31773.76	1.23
		3/2	32780.05	1.05
" "	3(5/2)	3/2	32181.50	0.725
		5/2	32856.62	1.051
		7/2	33240.37	1.17
4F13(2F7/2) 6S7S (3S)	(7/2,1)	9/2	32217.21	1.333
		7/2	32359.38	1.195
		5/2	32479.34	0.89
4F13(2F5/2) 5D6S (3D)	3(7/2)	5/2	33292.78	0.624
		7/2	33396.00	
		9/2	33726.70	1.14
4F12(3H6) 5D6S6P(4D)	(6,1/2)	11/2	33638.72	1.42
		13/2	33812.15	1.15
4F13(2F7/2) 6S7S (1S)	(7/2,0)	7/2	33961.04	1.15
4F12(3H5) 6S2 6P	(5,3/2)	7/2	33778.40	
		13/2	33943.28	1.13
		9/2	34310.33	0.995
		11/2	34532.90	1.126
4F13(2F5/2) 5D6S (1D)	1(1/2)	1/2	34069.26	0.666
		9/2	34587.99	1.00
		3/2	34999.00	0.897
		5/2	35673.63	
4F12(*3H4) 6S2 6P	(4,1/2)	9/2	35363.74	0.91
" "	(4,3/2)	11/2	38347.88	1.07
		7/2	38664.19	1.042
		9/2	38685.56	1.043
4F12(3H6) 5D6S6P(4D)	(6,3/2)	9/2	34457.86	1.185
		11/2	34691.79	1.16
		15/2	35557.70	1.255

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F12(3H6) 5D6S6P(4D)	(6,5/2)	7/2	34365.64	1.205
		9/2	35054.68	1.28
		13/2	35958.88	1.134
		15/2	36179.61	1.155
		11/2	36319.78	1.135
4F12(3H6) 5D6S6P(4F)	(6,7/2)	5/2	34194.09	1.24
		15/2	36273.93	1.13
4F12(3H6) 5D6S6P(2D)	(6,5/2)	17/2	35633.00	1.18
		15/2	37159.51	1.225
4F12 5D6S6P		7/2	35682.26	1.122
		13/2	36223.62	1.12
		9/2	36377.74	1.21
4F12(3H6) 5D6S6P(2D)	(6,3/2)	15/2	36653.90	1.13
4F12 5D6S6P		11/2	36656.72	1.16
		7/2	36934.23	1.285
		9/2	37010.53	1.11
		11/2	37276.78	1.25
		13/2	37365.12	1.20
		7/2	37519.46	1.09
		13/2	37646.18	1.175
		11/2	37657.93	1.01
		9/2	37768.66	1.215
4F12(3F3) 6S2 6P	(3,1/2)	7/2	37221.42	
4F12(3H6) 5D6S6P(4F)	(6,7/2)	17/2	37252.02	1.20
		15/2	37858.60	1.20
4F12 5D6S6P		11/2	37657.93	1.01
		9/2	37768.66	1.215
		13/2	38012.79	1.09
		11/2	38161.25	1.125
		7/2	38211.63	1.175
		9/2	38384.93	1.134
		7/2	38482.59	1.25
4F12(3H6) 5D6S6P(4F)	(6,9/2)	15/2	38485.84	1.145
4F12 5D6S6P		9/2	38499.02	1.064
		11/2	38529.68	1.17
		13/2	38588.46	1.212
		5/2	38751.80	1.215
		11/2	38877.22	1.065
		13/2	38915.90	1.22
		9/2	39244.58	1.05
4F13(2F7/2) 6S6D (3D)	3(3/2)	5/2	38861.95	1.565
		3/2	39602.91	1.30
		1/2	39737.59	0.81

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F13(2F7/2) 6S6D (3D)	3(11/2)	11/2	39089.53	1.09
		13/2	39157.56	1.24
		9/2	39220.04	1.12
.. ..	3(5/2)	7/2	39187.48	1.336
		5/2	39277.10	1.184
		3/2	39419.88	0.916
.. ..	3(7/2)	9/2	39322.01	1.153
		7/2	39462.80	1.12
		5/2	39658.86	0.96
4F13(2F7/2) 6S6D (1D)	1(3/2)	3/2	39061.83	1.34
		11/2	39362.65	1.13
		5/2	39470.50	1.04
		7/2	39542.19	1.06
		9/2	39741.92	1.112
4F13(2F7/2) 6S6D (3D)	3(9/2)	9/2	39444.30	1.13
		11/2	39479.87	1.21
		7/2	39628.00	1.04
4F12 5D6S6P		5/2	39386.96	1.084
		7/2	39413.67	1.165
		13/2	39434.15	1.15
		7/2	39480.28	1.17
		9/2	39488.24	1.095
		11/2	39563.00	1.11
		11/2	39709.04	1.17
4F12(3F3) 6S2 6P	(3,3/2)	7/2	40061.28	1.13
		9/2	40208.50	1.18
4F12 5D6S6P		13/2	40113.75	
		9/2	40322.53	1.115
		5/2	40347.28	1.14
		11/2	40376.20	
		9/2	40517.66	1.153
		7/2	40533.83	1.24
		7/2	40596.31	1.305
		11/2	40663.13	
		7/2	40763.90	1.178
		13/2	40780.89	1.22
		9/2	40855.59	1.08
		5/2	40938.60	1.20
		7/2	41012.39	1.15
		11/2	41081.38	1.295
		9/2	41109.37	1.19
		13/2	41274.90	1.12
4F13(2F5/2) 6S7S (3S)	(5/2,1)	3/2	40989.71	0.40
		5/2	41074.38	0.99
		7/2	41211.94	1.18
4F12(*3F2) 6S2 6P	(2,3/2)	7/2	41085.04	1.005

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F13(2F7/2) 6S8S (3S)	(7/2,1)	9/2	41078.54	1.32
		7/2	41211.94	1.18
		5/2	41325.86	0.90
4F12 5D6S6P		7/2	41425.48	1.10
		7/2	41525.20	1.106
		5/2	41533.57	1.025
		11/2	41569.11	1.205
		9/2	41576.15	1.249
4F13(2F7/2) 6S8S (1S)	(7/2,0)	7/2	41646.13	1.16
4F12 5D6S6P		11/2	41687.39	1.145
		3/2	41743.41	0.913
		9/2	41786.25	1.25
		11/2	41874.37	1.16
		9/2	41881.74	1.18
		13/2	41917.23	1.15
		3/2	42052.32	
		11/2	42119.08	1.10
		7/2	42133.27	1.17
		5/2	42179.89	1.05
4F13(2F7/2) 6P2 (3P)	(7/2,0)	7/2	41841.61	1.21
4F12 5D6S6P		5/2	42367.62	1.20
		7/2	42370.71	1.043
		13/2	42406.66	1.125
		11/2	42541.37	1.10
		9/2	42561.53	1.06
		11/2	42581.98	1.135
		9/2	42594.05	1.09
		5/2	42705.90	1.095
4F13(2F5/2) 6S7S (1S)	(5/2,0)	5/2	42735.20	
4F12 5D6S6P		7/2	42742.02	1.19
		9/2	42770.79	1.215
		9/2	42839.49	1.086
4F12(3F4) 5D6S6P(4F)	(4,9/2)	15/2	42855.45	1.124
4F12 5D6S6P		13/2	42910.04	1.20
		11/2	42961.88	1.205
		9/2	43030.30	1.143
		7/2	43034.15	1.15
4F12(3H6) 5D6S6P(2F)	(6,5/2)	15/2	43051.55	1.19
4F12 5D6S6P		5/2	43113.66	1.114
		11/2	43186.34	1.196
		3/2	43230.70	0.99
		13/2	43288.71	1.175
		11/2	43408.97	1.20

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.	
4F12	5D6S6P	7/2	43428.79	1.155	
		13/2	43438.24	1.23	
4F13(2F7/2)	6P2 (3P)	(7/2,1)	7/2	43052.54	1.055
			5/2	43430.76	1.09
			9/2	43429.37	1.20
4F12	5D6S6P	11/2	43447.87	1.105	
		9/2	43544.57		
4F12(3H5)	5D6S6P(4F)	(5,7/2)	15/2	43614.26	1.12
4F12	5D6S6P	9/2	43675.27	1.04	
		11/2	43974.64	1.14	
		13/2	43979.30		
		13/2	44072.58		
		5/2	44182.35	1.17	
4F12(*1G4)	6S2 6P	(4,1/2)	9/2	44001.28	1.04
			7/2	44142.40	1.02
4F12(3H5)	5D6S6P(2D)	(5,5/2)	15/2	44210.41	1.15
4F12	5D6S6P	7/2	44263.97	0.905	
		5/2	44300.24	1.09	
		13/2	44307.18	1.13	
4F12(3H5)	5D6S6P(4F)	(5,9/2)	19/2	44334.65	1.18
4F12	5D6S6P	11/2	44383.64		
		7/2	44418.40		
4F13(2F7/2)	6P2 (3P)	(7/2,2)	11/2	44180.93	1.17
			9/2	44316.72	1.15
			7/2	44456.23	
			3/2	44483.36	1.005
			5/2	44855.22	1.045
4F12(3H6)	5D6S6P(2D)	(6,3/2)	15/2	44565.84	1.135
4F12(3H6)	5D6S6P(2F)	(6,7/2)	17/2	44571.81	1.18
4F12	5D6S6P	13/2	44591.14	1.04	
		11/2	44747.01	1.17	
		9/2	44774.26		
		13/2	44803.86	1.105	
		9/2	44868.17	1.10	
		11/2	45058.38	1.055	
		9/2	45070.58		
		9/2	45147.28		
		11/2	45288.96	1.155	
		13/2	45389.07		
		7/2	45408.66	1.105	
		11/2	45485.87		
		11/2	45635.73	1.14	

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F12(3H6) 5D6S6P(2F)	(6,5/2)	15/2	45557.72	1.164
4F12(3H5) 5D6S6P(4D)	(5,5/2)	15/2	45608.76	1.15
4F12 5D6S6P		13/2	45660.65	1.19
		11/2	45810.50	1.225
4F12(3H5) 5D6S6P(4D)	(5,7/2)	15/2	45934.52	1.165
4F12 5D6S6P		11/2	46163.58	
4F13(2F7/2) 6P2 (1D)	(7/2,2)	9/2	46221.42	
		11/2	46850.44	1.145
4F12(3H6) 5D6S6P(2F)	(6,7/2)	15/2	46461.06	1.18
		13/2	46767.70	1.17
4F12 5D6S6P		13/2	46597.68	1.18
		11/2	46850.44	1.145
		13/2	47027.44	1.17
		13/2	47214.31	1.135
		11/2	47484.83	1.115
4F12(3H5) 5D6S6P(2F)	(5,5/2)	15/2	47630.52	1.162
4F12 5D6S6P		13/2	47644.94	1.175
		13/2	47759.37	1.16
4F12(3H4) 5D6S6P(4F)	(4,7/2)	15/2	47886.00	1.15
4F12 5D6S6P		13/2	48115.65	1.17
		9/2	41124.34	1.244
		5/2	42902.51	1.04
		7/2	43588.18	1.248
		13/2	44418.70	1.13
		15/2	50563.91	1.18
		13/2	51298.36	
		13/2	51466.74	
		11/2	51756.67	

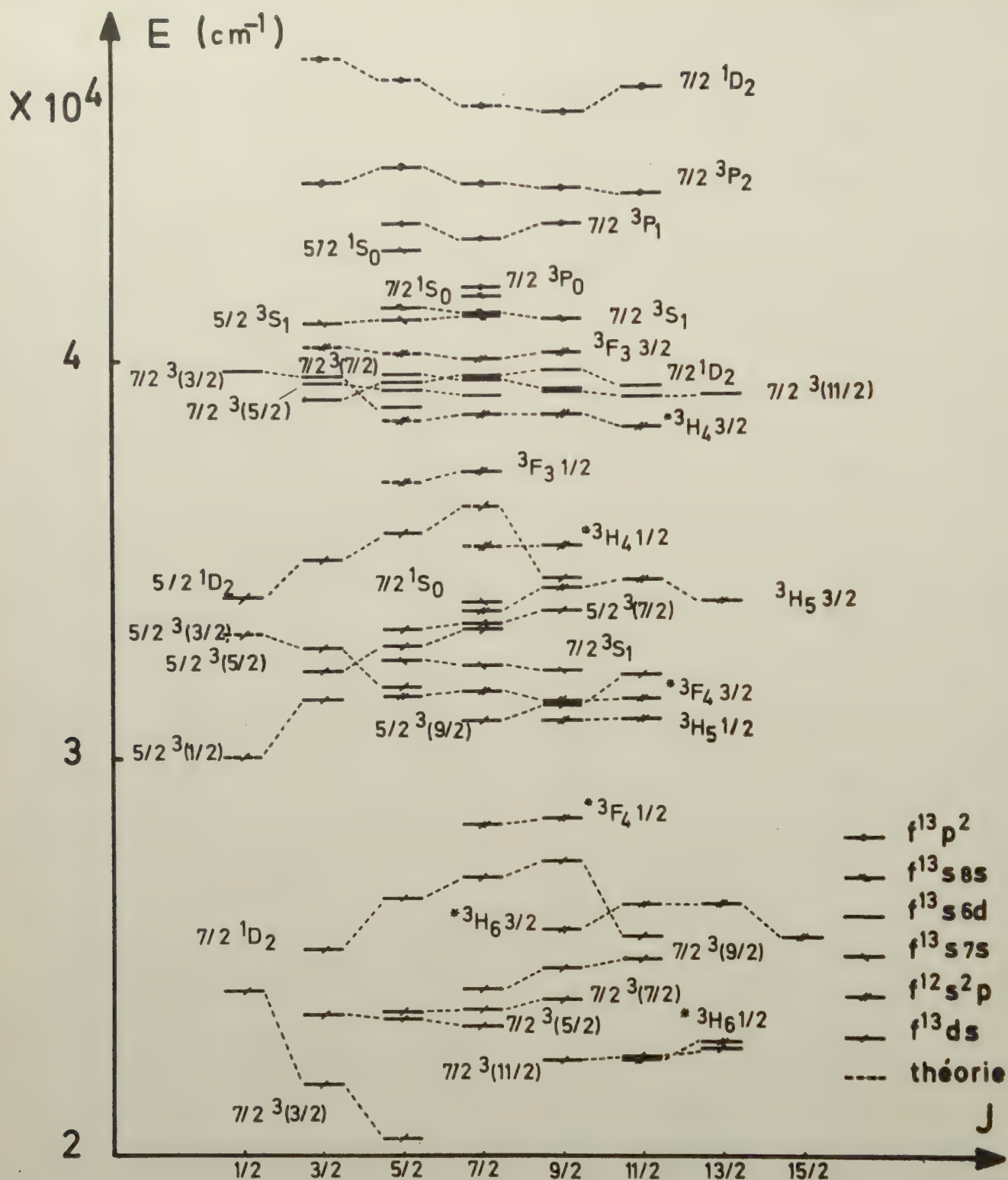


fig. 11

- Diagramme d'énergie des niveaux impairs de Tm I -

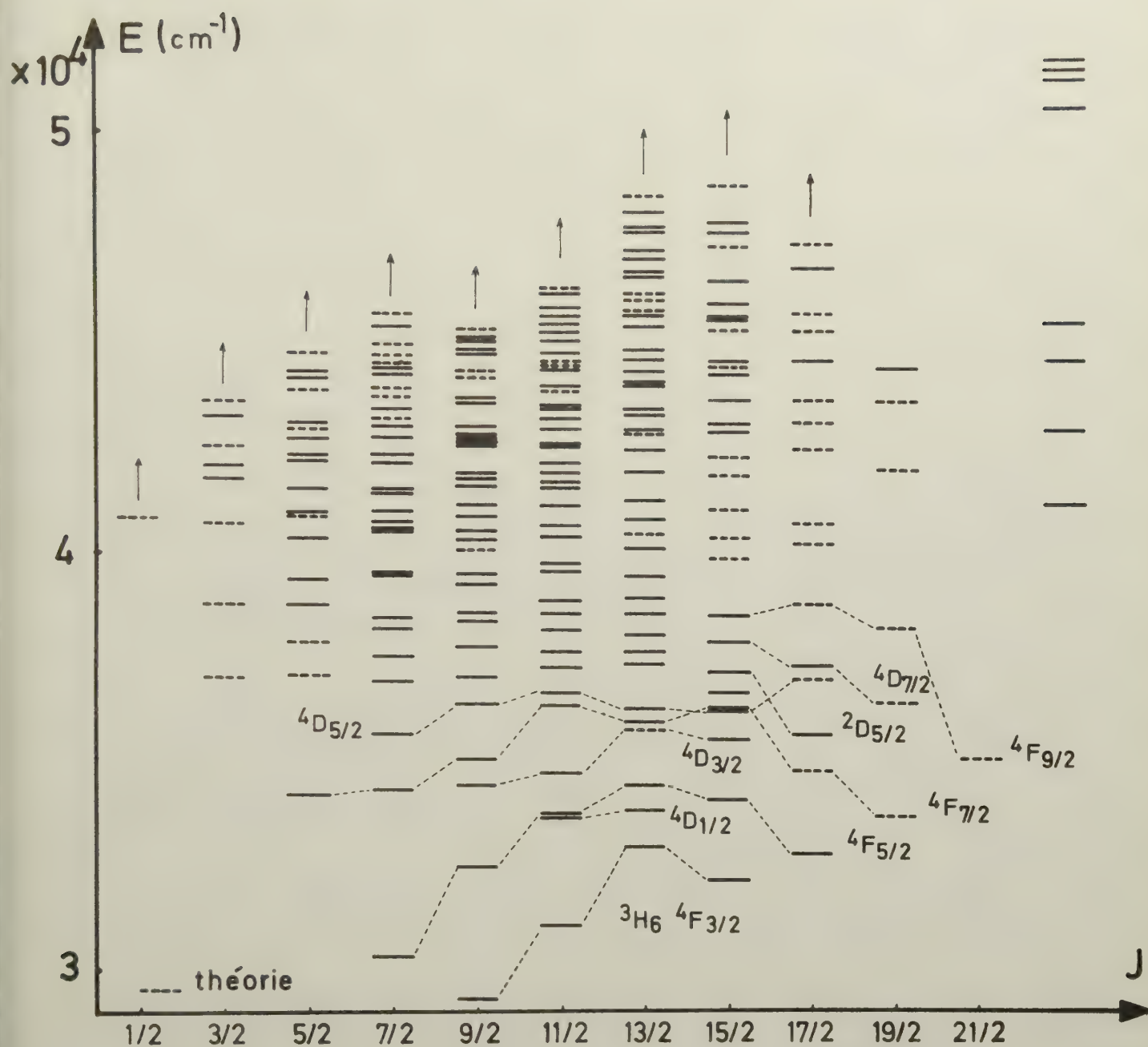


fig. 12

- Diagramme d'énergie des niveaux de $f^{12}dsp$ -

d'onde reste indéterminée, et le calcul des intégrales dipolaires électriques qui n'interviennent pas directement dans l'énergie, est impossible. Pour déterminer les fonctions d'onde radiales et accéder à ces grandeurs nous avons utilisé la méthode de calcul absolue de Hartree-Fock.

Le principe variationnel de cette méthode est totalement différent de la méthode empirique paramétrique fondée sur la théorie des perturbations et il n'est pas certain que l'on puisse utiliser dans l'une, les quantités déterminées par l'autre. Pour justifier a posteriori un tel procédé de calcul, nous comparerons les résultats expérimentaux aux valeurs théoriques des forces d'oscillateur des raies et des durées de vie des niveaux.

1 - Généralités

La force de raie $S_{JJ'}$, entre deux états atomiques $|\psi J\rangle$ et $|\psi' J'\rangle$ est donnée, pour un rayonnement de nature dipolaire électrique par la relation suivante :

$$S_{JJ'} = \langle \psi J || C^{(1)} || \psi' J' \rangle^2 \langle \psi || e r || \psi' \rangle^2$$

La première partie de $S_{JJ'}$, est un élément de matrice réduit dont l'expression en couplage intermédiaire est donnée par :

$$D_{\psi\psi'} = \sum_{\substack{SL \\ S'L'}} a_{SLJ} \langle \psi SLJ || C^{(1)} || \psi' S'L'J' \rangle a'_{S'L'J'}$$

où a_{SLJ} et $a'_{S'L'J'}$ sont les coefficients des vecteurs propres sur la base LS toujours choisie, dans nos calculs, comme base de départ. La partie angulaire $\langle \psi SLJ || C^{(1)} || \psi' S'L'J' \rangle$ est exprimée simplement en termes de symboles $3n - j$ par couplage ou découplage successifs des moments angulaires, suivant les règles exposées par B.R. JUDD. La deuxième partie de $S_{JJ'}$, purement radiale, est donnée par l'intégrale suivante :

$$I(nl, n'l') = \langle \psi || er || \psi' \rangle = e \int_0^{\infty} R_{nl}^* R_{n'l'} r dr$$

où R_{nl} et $R_{n'l'}$ sont des fonctions d'onde radiales monoélectroniques, définies à partir des solutions $\psi^{(k)}$ du type champ central qui vérifient le principe variationnel telles que :

$$\psi^{(k)} = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \delta(\sigma, m_s)$$

et $\int_0^{\infty} R_{nl}^2(r) dr = 1$.

Ces fonctions d'onde radiales, obtenues à l'aide du programme Hartree-Fock SCF de C.FROESE-FISCHER et M. WILSON [32] sont, nous tenons à la souligner, ni rigoureusement orthogonales, ni identiques pour tous les états d'une même configuration.

Comme il a été annoncé plus haut, nous avons pris soin, dans les représentations multiconfigurationnelles, de choisir pour signe des paramètres $R^k(l'l', l''l''')$, celui des intégrales de Slater $R^k(l'l', l''l''')$ déterminées par la méthode HF.

En effet, prenons à titre d'exemple la racine carrée de la force de raie $S_{7/2} J'$, entre le niveau fondamental ${}^2F_{7/2}$ de $f^{13}s^2$ et un niveau pair J' appartenant aux configurations mélangées $f^{13}_{sp} + f^{12}_{ds^2}$; elle s'exprime sous la forme suivante :

$$(S_{7/2} J')^{\frac{1}{2}} = (S_{7/2}, \psi' (f^{13}_{sp^2}) J')^{\frac{1}{2}} + (S_{7/2}, \psi' (f^{12}_{ds^2}) J')^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{avec } (S_{7/2}, \psi' (f^{13}_{sp}) J')^{\frac{1}{2}} = (-1)^{\alpha} D_{2F_{7/2}, \psi' (f^{13}_{sp})} I(6s6p)$$

$$\text{et } (S_{7/2}, \psi' (f^{12}_{ds^2}) J')^{\frac{1}{2}} = (-1)^6 D_{2F_{7/2}, \psi' (f^{12}_{ds^2})} I(4f5d)$$

La force de raie $S_{7/2} J'$ fait intervenir un terme d'interférence dont l'importance est grande si les deux forces de raie monoconfigurationnelles sont du même ordre de grandeur.

2 - Détermination des coefficients $D_{\psi\psi'}$ et des intégrales dipolaires électriques $I(nl, n'l')$

Les éléments de matrice réduits de l'opérateur $C^{(1)}$, sur les fonctions de base LS ou JJ choisies, sont donnés par les formules 26, 27, 28 et 29 de l'annexe pour les transitions entre les configurations paires f^{13}_{sp} et $f^{12}_{ds^2}$, et impaires $f^{13}_{s^2}$, f^{13}_{ds} et $f^{12}_{s^2p}$ étudiées.

Le tableau 16 rassemble les valeurs des intégrales dipolaires électriques $I(nl, n'l')$ entre les configurations paires et impaires de Tm I.

TABLEAU 16 - Valeurs Hartree-Fock des intégrales dipolaires en u.a.

Configurations paires Configurations impaires				
	$f^{12}_{5d} 6s^2$	$f^{13}_{6s} 6p$	$f^{12}_{5d^2} 6s$	$f^{13}_{5d} 6p$
$f^{13}_{6s^2}$	0,526 (,86)	-4,856 (,99)		
$f^{13}_{5d} 6s$		3,937 (,97)	0,507 (,87)	-5,034 (,99)
$f^{12}_{6s^2} 6p$	2,219 (,92)			
$f^{12}_{5d} 6s 6p$	-4,600 (,99)	0,531 (,86)	2,703 (,95)	
$f^{13}_{6p^2}$		-4,613 (,99)		3,302 (,90)
$f^{13}_{5d^2}$				4,769 (,98)

Note : Les facteurs d'annulation entre parenthèses sont définis dans [33]

On peut remarquer que les valeurs de I (6s6p) varient très peu d'une configuration à l'autre, comme celles plus faibles de I (4f 5d). A l'opposé, l'intégrale I (5d6p) (électrons interne-externe) est très sensible à la nature de la partie électronique commune des configurations.

3 - Calcul des forces de raie . Comparaison avec l'expérience des intensité, force d'oscillateur et durée de vie calculées

Les forces de raie $S_{JJ'}$, calculées entre les niveaux du terme fondamental 2F de $f^{13}s^2$ et quelques niveaux pairs de $J = 5/2, 7/2, 9/2$ e de $f^{13}sp + f^{12}ds^2$, sont rassemblées dans le tableau 17 pour montrer l'importance du mélange des deux configurations. Les valeurs des intégrales $I(nl, n'l')$, utilisées dans nos calculs, sont celles du tableau 16.

La puissance rayonnée, en émission spontanée, proportionnelle à l'intensité des raies spectrales, est donnée par la relation :

$$\frac{dE}{dt} = \sigma A_{J,J'} N_{J'}$$

avec $N_{J'}$ la population du niveau supérieur

et $A_{J,J'}$ le coefficient d'émission spontanée.

Ce coefficient $A_{J,J'}$ est égal à :

$$A_{J,J'} (s^{-1}) = \frac{2,026 \cdot 10^{-6}}{g_{J'}} S_{JJ'} \sigma^3$$

avec $g_{J'}$ le poids statistique du niveau de départ

$S_{JJ'}$ la force de raie de la transition en u.a.

σ l'énergie de la transition en cm^{-1} .

TABLEAU 17 - Forces de raie et forces d'oscillateur calculées des transitions de quelques niveaux pairs, compris entre 22900 et 27000 cm^{-1} , avec le niveau fondamental $^2F_{7/2}$

Niveau (cm^{-1})	J'	Composante $ 7/2 \ ^1P_1 \rangle$	D (f^{13}_{sp})	D ($f^{12}_{ds^2}$)	$S_{7/2 \ J'}$ (u.a.)	$f_{7/2 \ J'}$
22930	5/2	0,29472	-0,41680	0,08479	4,27865	0,03725
23782	9/2	0,33845	-0,61792	0,21233	9,68604	0,08746
23873	7/2	0,47262	0,77178	-1,76669	21,88069	0,19834
24349	9/2	0,53130	-0,97001	-0,80630	18,36619	0,16979
24418	5/2	0,70526	-0,99738	-0,70899	19,97840	0,18523
25656	5/2	0,11076	-0,15664	0,07442	0,63962	0,00623
25717	7/2	-0,34981	-0,57124	0,50201	9,22981	0,09013
25745	5/2	-0,53121	0,75124	-0,16714	13,95620	0,13643
26646	9/2	-0,44452	0,81158	-0,80685	19,05829	0,19282
26701	7/2	-0,62221	-1,01607	-0,47169	21,95288	0,22257
26889	9/2	-0,55361	1,01076	0,30374	22,54360	0,23016

Note : Les forces de raie et forces d'oscillateur calculées entre les niveaux pairs de $f^{12}_{5d6s^2} + f^{13}_{6s6p}$ et les niveaux impairs de $f^{13}_{6s^2} + f^{13}_{5d6s} + f^{12}_{6s^2 6p}$ sont à la disposition des lecteurs qui en feront la demande au Laboratoire Aimé Cotton.

La force d'oscillateur $f_{JJ'}$ en absorption des raies est déterminée à l'aide de la relation suivante :

$$f_{JJ'} \text{ (sans dimension)} = \frac{3,0376 \cdot 10^{-6}}{g_J} S_{JJ'} \sigma$$

avec g_J le poids statistique du niveau de départ. La durée de vie du niveau J' est donnée par :

$$\tau^{-1} \text{ (s}^{-1}\text{)} = \sum_J A_{J'J}$$

où la sommation est faite sur tous les niveaux de J égal à J' , $J' \pm 1$ et l'énergie $E_J < E_{J'}$.

Les intensités relatives des raies entre les niveaux pairs de $f^{13}\text{sp} + f^{12}\text{ds}^2$ et le multiplet fondamental ^2F de $f^{13}\text{s}^2$, ont déjà été comparées dans le tableau IV de l'article que nous avons publié en 1966 [40]. Nous tenons à remercier C.H. CORLISS de nous avoir signalé l'omission, dans ces calculs, du facteur $e^{-E/kT}$ avec $T = 5100^\circ \text{K}$; ce facteur améliore encore la comparaison entre les intensités théoriques et les intensités mesurées par W.F. MEGGERS et C.H. CORLISS. Ces calculs avaient montré l'importance du mélange des deux configurations $f^{13}\text{sp}$ et $f^{12}\text{ds}^2$; en particulier, des termes ($7/2 \ ^1\text{P}_1$) et ($5/2 \ ^1\text{P}_1$) dont les niveaux sont seuls habilités à donner des transitions fortes avec les niveaux respectifs, $^2\text{F}_{7/2}$ et $^2\text{F}_{5/2}$, de $f^{13}\text{s}^2$.

Depuis, V.A. KOMAROVSKII et N.P. PENKIN [44] ont mesuré les forces d'oscillateur relatives des raies à l'aide de la méthode du "hook". Les quantités $f_{JJ'}$ calculées, ont été multipliées par un facteur constant minimisant l'écart entre théorie et expérience pour les forces d'oscillateur relatives les plus grandes.

Les résultats sont comparés dans le tableau 18.

TABLEAU 18 - Forces relatives d'oscillateur mesurées et calculées des raies de Tm I

Longueurs d'onde λ ($\text{\AA}$)	Niveaux (cm^{-1})	J	f _{JJ'} relative	
			mesurée [44]	calculée
5971,26	16742	7/2	4,96	5,22
5764,29	17343	7/2	11,3	35,5
5675,83	17614	9/2	42,1	68,5
5631,41	17752	5/2	22,2	37,1
5307,12	18837	9/2	61,7	210,0
5113,97	19549	5/2	4,82	4,2
5060,89	19754	7/2	9,69	4,7
4733,33	21121	7/2	38,5	19,5
4724,26	21161	5/2	7,5	0,7
4599,02	21737	9/2	13,3	45,9
4386,43	22791	7/2	62,7	147,8
4359,93	22930	5/2	143	189
4203,73	23782	9/2	435	443,9
4187,61	23873	7/2	842	1006
4105,84	24349	9/2	1000	862
4094,19	24418	5/2	900	940
3896,62	25656	5/2	33,8	31,6
3887,35	25717	7/2	452	457
3883,13	25745	5/2	917	692

TABLEAU 18 (suite)

3826,39	26127	5/2	31,7	28
3781,15	26440	7/2	11,6	1,4
3751,81	26646	9/2	273	978
3744,06	26701	7/2	1040	1129
3717,91	26889	9/2	1860	1168
3567,36	28024	9/2	53	5,1
3563,88	28051	5/2	72,7	56,2
3514,00	28449	5/2	13,9	24,6
3500,92	28555	7/2	9,53	2,4
3416,59	29260	7/2	55	7,3
3410,05	29317	9/2	115	122
3318,65	30124	7/2	9,22	5,3
3299,11	30302	5/2	14,5	5,3
3233,74	30915	9/2	533	26,6
3180,56	31432	5/2	278	37,2
3179,69	31440	9/2	12,9	52,8
3172,65	31510	9/2	12,9	52,8
3081,12	32446	7/2	144	214
3046,87	32811	7/2	134	147
2973,22	33624	7/2	163	84
2932,97	34085	5/2	52,4	95
2914,84	34297	7/2	52,2	47

Si les petites valeurs des forces d'oscillateur relatives, très sensibles aux légères fluctuations des fonctions propres, et les valeurs discordantes des niveaux élevés sont éliminées, l'accord théorie-expérience est en moyenne de 30 %. Les grandeurs théoriques des niveaux 26646 $9/2$ et 26889 $9/2$ diffèrent des valeurs expérimentales et les pourcentages des vecteurs propres de ces niveaux sur le terme ($7/2 \ ^1P_1$) sont très sensibles au jeu de paramètres choisi. Dans la théorie de 1966, pour un jeu de paramètres optimisé sur 68 niveaux expérimentaux, ces pourcentages étaient respectivement 14 et 38 %; ce qui donne les forces d'oscillateur relatives, 716 et 1485, plus proches des valeurs expérimentales. Avec les valeurs des paramètres de la table 1, obtenues à partir de 80 niveaux observés, les pourcentages sont devenus 20 et 30 %. L'accord théorie-expérience se dégrade à mesure que les niveaux sont plus élevés en raison de la négligence des interactions avec les configurations élevées, c'est-à-dire de la moins bonne qualité des fonctions d'onde en couplage intermédiaire.

Pour confirmer ces prévisions théoriques, les durées de vie calculées des niveaux, dont les grandeurs sont comprises entre 0,1 et $10 \cdot 10^{-7}$ s, sont comparées, dans le tableau 19, aux valeurs mesurées par effet Hanle dans les expériences de croisement de niveaux de R. WALLENSTEIN et H. WALTHER [45]. L'accord théorie HF - expérience est bon, exception faite du niveau 16957 $7/2$ pour lequel l'incertitude sur la durée de vie calculée est très grande. En effet la force de raie avec le niveau fondamental $^2F_{7/2}$ résulte d'une interférence presque totalement destructive entre les forces de raie des composantes en f^{13}_{sp} et $f^{12}_{ds^2}$ du niveau. La colonne 3 donne les résultats des durées de vie calculées, en ajustant empiriquement les valeurs des intégrales dipolaires électriques, pour minimiser l'écart entre durées de vie mesurées et calculées des niveaux profonds marqués d'un astérisque.

TABLEAU 19 - Durée de vie de quelques niveaux de Tm I.

Niveaux (cm ⁻¹)	J	τ (unité : 10 ⁻⁷ s)		
		HF	Effet Hanle Ref.[45]	I.dipolaires empiriques Ref.[45]
		I(6s6p) = -4,86 u.a. I(4f5d) = 0,53 u.a.		I(6s6p) = -3,8 (4) u.a. I(4f5d) = 0,08(30) u.a.
16957*	7/2	165	14 ±4	23
17343*	7/2	7,1	21 ±6	20
17613*	9/2	4,5	7,6 ±0,7	7,9
17752*	5/2	4,9	7,6 ±0,7	7,6
18837*	9/2	1,3	4,5 ±0,4	4,1
21121*	7/2	8,7	5,0 ±0,5	6,0
21737*	9/2	4,4	17 ±5	15
22791	7/2	1	2,5 ±0,2	1,8
22930	5/2	0,55	0,74 ±0,07	0,97
23781	9/2	0,38	0,40 ±0,04	0,66
23873	7/2	0,13	0,170±0,017	0,377
24348	9/2	0,19	0,160±0,016	0,262
24418	5/2	0,10	0,096±0,010	0,146
26889	9/2	0,11	0,177±0,018	0,175

L'accord entre les valeurs empiriques et expérimentales est fortement dégradé pour les niveaux de courte durée de vie. Pour ces niveaux la précision des mesures de R. WALLENSTEIN et H. WALTHER est légèrement plus grande et nous pensons que nos valeurs HF sont les plus significatives, même en comptant avec la durée de vie discordante du niveau $16957 \frac{7}{2}$.

Les résultats expérimentaux de la force d'oscillateur de la raie $3717,91 \overset{\circ}{\text{Å}}$ et de la durée de vie du niveau $26889 \frac{9}{2}$ sont contradictoires avec le résultat du calcul; en effet, pour expliquer la valeur 1860 mesurée par V.A. KOMAROVSKII et N. PENKIN, il faudrait que la force de raie calculée S_{JJ} , soit deux fois plus grande; résultat qui diminuerait d'autant la durée de vie calculée, déjà trop faible devant la valeur mesurée.

En conclusion, nous pensons que cette méthode pour calculer les durées de vie des atomes complexes n'est pas dénuée d'intérêt à condition qu'une sérieuse étude du couplage intermédiaire ait été faite. Il est certain qu'une méthode de calcul absolu des fonctions d'onde radiales, comme celle du potentiel paramétrique développée par M. KLAPISCH [46], cohérente avec l'approximation du champ central et la théorie des perturbations, permettrait de chiffrer quantitativement les approximations faites. Encore faudrait-il que les dimensions du problème que nous avons traité, ne soient pas l'obstacle majeur à l'utilisation de cette méthode.

CHAPITRE III

CLASSIFICATION DU SPECTRE D'ÉTINCELLE DU Tm

Les premières études du spectre d'étincelle sont dues à W.F. MEGGERS [36] qui a déterminé la configuration fondamentale $4f^{13}6s$ et soixante-six niveaux pairs, et N. SPECTOR [47] [48] qui a interprété la structure de quarante niveaux d'énergie parmi les plus profonds des configurations $4f^{13}6p$, $4f^{12}5d6s$, $4f^{12}6s^2$ et $4f^{12}6s6p$. En 1965, à l'aide des mesures de longueurs d'onde infrarouges [13] et des spectrogrammes Zeeman, nous avons mis en évidence avec J. BLAISE [37] la première configuration impaire excitée $4f^{13}5d$ et publié une première liste de niveaux accompagnés des facteurs de Landé g observés. C'est en liaison avec J. SUGAR que depuis 1966 nous avons poursuivi la classification.

III - 1 - DIAGRAMME D'ENERGIE DES CONFIGURATIONS IDENTIFIEES

En partant des multiplets fondamentaux 3F et 1F de $f^{13}6s$, et des niveaux pairs profonds trouvés par N. SPECTOR, nous avons établi les facteurs de Landé g de 99 niveaux pairs et 42 niveaux impairs. L'étude empirique des ensembles de configurations $f^{13}(d + s)$, $f^{12}(d + s)p$ et $f^{13}p + f^{12}(d + s)^2$ a permis l'identification des configurations élevées $f^{12}d^2$, $f^{12}dp$ et $f^{13}7s$.

Au total, 200 niveaux impairs et 156 niveaux pairs sont actuellement connus et identifiés.

Le tableau 20 rassemble les positions des niveaux profonds des configurations étudiées.

TABLEAU 20 - Niveaux profonds des configurations électroniques de Tm II.

Configurations impaires			Configurations paires		
Nom	Niveau (cm^{-1})	J	Nom	Niveau (cm^{-1})	J
$4f^{13}6s$	0	4			
$4f^{13}5d$	17624,65	2	$4f^{12}6s^2$	12457,29	6
$4f^{12}6s6p$	38225,46	6	$4f^{12}5d6s$	16567,47	5
$4f^{12}5d6p$	44838,25	4	$4f^{13}6p$	25980,02	3
$4f^{13}7s$	53673,03	4	$4f^{12}5d^2$	30508,76	4

Toutes les configurations trouvées dans le spectre de Yb II [49] (à l'exception de $f^{13}8s$ et $f^{13}9s$) ont été mises en évidence dans Tm II. La figure 13 représente le diagramme d'énergie de Tm II. Les transitions situées dans l'infrarouge sont indiquées en trait gras et les flèches rappellent le sens de la progression suivie dans la classification du spectre. Il apparaît que les configurations construites sur le coeur f^{12} sont très proches les unes des autres. Ceci impliquera par la suite dans les calculs empiriques l'emploi de bases multiconfigurationnelles très étendues. Seule parmi les configurations encore profondes, $f^{12}p^2$ n'a pas été identifiée. Sa position est attendue vers 62000 cm^{-1} et il est, actuellement, impossible de la mettre en évidence car les ultimes niveaux observés de cette parité sont situés à 44000 cm^{-1} . Quelques 7000 raies de la liste de J. SUGAR ont été classées (*).

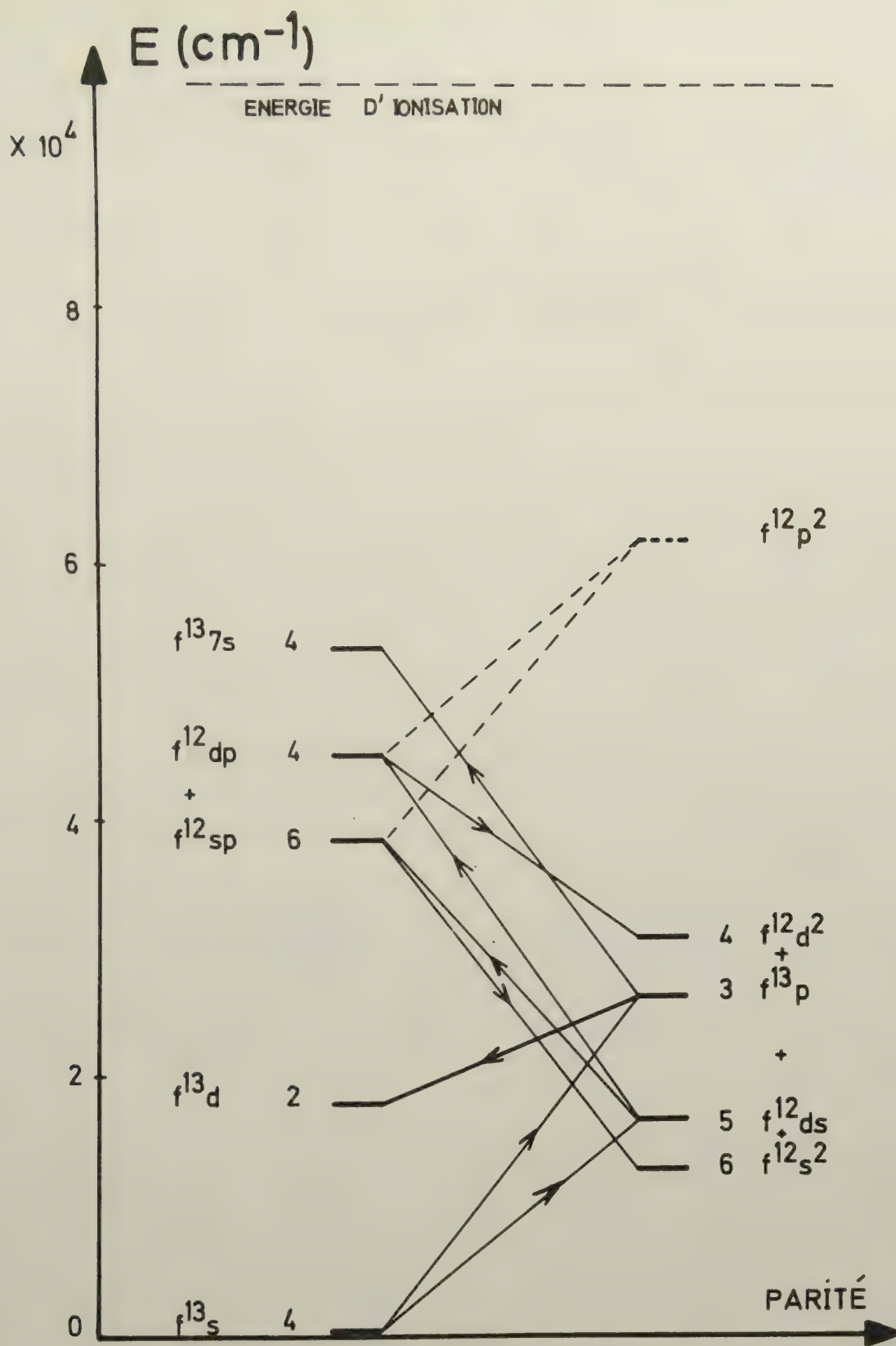


fig. 13

- Position des configurations de Th II -

(*) Cette liste peut être demandée au Laboratoire Aimé Cotton; elle sera publiée ultérieurement au Journal de Recherche du N B S en collaboration avec J. SUGAR.

III - 2 - CONFIGURATIONS PAIRES

1 - $4f^{12}5d6s$

La configuration $f^{12}ds$ a été calculée dans le couplage de base $((((f^{12}) S_1 L_1, d) S_2 L_2, s) SLJ)$. La partie angulaire des intégrales de Slater de l'interaction électrostatique $Q(f^{12}d)$ est donnée par les formules de B.R. JUDD [39], et celles de $Q(f^{12}s)$ et $Q(ds)$, par J.C. SLATER [50]. L'interaction spin-orbite des électrons introduit deux intégrales de structure fine ζ_f et ζ_d .

2 - $4f^{12}5d^2$

La configuration $f^{12}d^2$ a été calculée dans le couplage de base LS, $((f^{12}) S_1 L_1, (d^2) S_2 L_2) SL$. L'énergie électrostatique Q est la somme de $Q(f^{12}) + Q(d^2) + Q(fd)$.

Les énergies électrostatiques des groupes d'électrons équivalents f et d , sont données par G. RACAH [24] en fonction des paramètres E^1, E^2, E^3 et B, C qui sont les combinaisons linéaires des intégrales F^k correspondantes.

$Q(fd)$ introduit les cinq intégrales; F_2, F_4, G_1, G_3, G_5 .

L'énergie spin-orbite $\Lambda(f^{12}d^2)$ introduit deux paramètres ζ_f et ζ_d .

$$3 - 4f^{12}(5d+6s)^2 + 4f^{13}_p$$

Les configurations $f^{12}s^2$, $f^{12}ds$, f^{13}_p et $f^{12}d^2$, très proches en énergie les unes des autres, ont été assemblées en une seule configuration représentée par l'expression : $f^{12}(d^2 + ds + s^2) + f^{13}_p$.

Afin de traiter l'énergie électrostatique Q de cet ensemble multiconfigurationnel, il est nécessaire d'introduire les intégrales de Slater $R^k(l'l', l''l''')$ qui interviennent pour les couples d'électrons ll' et $l''l'''$ dont les configurations diffèrent.

Les formules des coefficients angulaires de ces intégrales, calculées avec la méthode graphique de A. JUCYS, sont en annexe (10 à 20).

Les dimensions de ces quatre configurations sont données par valeur de J dans le tableau 21.

TABLEAU 21 - Configuration $f^{12}(d + s)^2 + f^{13}_p$

Configurations	Nb. de niveaux	J										
		0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$f^{12}s^2$	13	2	1	3	1	3	1	2				
$f^{12}ds$	214	8	23	34	38	36	30	22	14	7	2	
f^{13}_p			1	3	4	3	1					
$f^{12}d^2$	457	21	40	70	71	78	61	52	31	21	8	4
$f^{12}(d+s)^2 + f^{13}_p$	696	31	65	110	114	120	93	76	45	28	10	4

155 niveaux expérimentaux ont été interprétés avec un écart $\overline{\Delta E}$ de 105 cm^{-1} , qui représente 0,3 % de l'intervalle d'énergie des niveaux observés. Le jeu de paramètres est celui de la table 8.

Les paramètres, qui contribuent faiblement à l'énergie des niveaux observés, ont été fixés ou liés par des rapports constants. Les signes des paramètres $R^k(l l', l'' l''')$ sont ceux des intégrales HF correspondantes.

La comparaison théorie-expérience est faite dans le tableau 22. La limite des énergies théoriques des niveaux est fixée volontairement à 48000 cm^{-1} afin d'alléger la présentation.

Le pourcentage de composition de chaque vecteur propre dans les configurations $f^{12}s^2$, $f^{12}ds$, $f^{13}p$ et $f^{12}d^2$ montre l'importance, dans cette étude paramétrique, du traitement des interactions de configurations proches. Le mélange des fonctions propres de $f^{12}ds$ et $f^{13}p$ conditionne l'intensité des raies observées entre les niveaux pairs et la configuration fondamentale $f^{13}s$.

Les transitions de $f^{13}p$ à $f^{13}s$ sont les plus fortes du spectre car l'intégrale dipolaire HF $I(6s,6p)$ est 8 fois plus grande que celle de $I(4f,5d)$. Par exemple, tous les niveaux $J = 1$ dont la composante en $f^{13}p$ n'est pas nulle, ont été trouvés, malgré le petit nombre de leurs transitions possibles avec les niveaux impairs. C'est encore pour cette raison qu'aucune transition n'est observée entre les niveaux fondamentaux de $f^{13}s$ et le niveau 3F_2 de $f^{12}s^2$, lequel est pur à 100 %.

Les changements de base ont été effectués uniquement pour la sous-configuration $f^{12}ds + f^{13}p$, le rang des matrices de l'ensemble $f^{12}(d+s)^2 + f^{13}p$ étant plus grand que 100.

TABLE 8 - Paramètres de $4f^{12} (5d + 6s)^2 + 4f^{13} 6p$ -

Configurations	Paramètres	Valeurs (cm^{-1})	Ecart-types (cm^{-1})
1 $f^{12} s^2$	T	26 337	51
2 $f^{12} ds$	L_1	15 651	186
3 $f^{12} d^2$	D_2	34 444	319
4 $f^{13} p$	L_3	7 378	125
1	$E^1 (f^{12})$	6 910	fixé
	$E^2 (f^{12})$	31,4	fixé
	$E^3 (f^{12})$	671	fixé
2	$E^1 (f^{12})$	6 923	35
	$E^2 (f^{12})$	31,4	E^2/E^1 fixé
	$E^3 (f^{12})$	672	E^3/E^1 fixé
3	$E^1 (f^{12})$	7 072	fixé
	$E^2 (f^{12})$	32,1	fixé
	$E^3 (f^{12})$	686	fixé
2	$F_2 (fd)$	177	2
	$F_4 (fd)$	14	1
	$G_1 (fd)$	161	4
	$G_3 (fd)$	16	1
	$G_5 (fd)$	4,2	0,2
	$F_2 (fd)$	160	4
	$F_4 (fd)$	11,5	F_4/F_2 fixé

3	G_1 (fd)	143	5
	G_3 (fd)	17,5	G_3/G_1 fixé
	G_5 (fd)	3,3	G_5/G_1 fixé
	G_3 (fs)	212	28
	G_2 (ds)	2 392	119
	F_2 (fp)	76	fixé
	G_2 (p)	4,8	2,5
	G_4 (fp)	3,6	G_4/G_2 fixé
1	ζ_f (f^{12})	2 699	27
2	ζ_f (f^{12})	2 653	9
3	ζ_f (f^{12})	2 663	fixé
	ζ_f (f^{13})	2 588	37
2	ζ_d	1 017	18
3	ζ_d	978	32
	ζ_p	2 401	95
1 - 3	R^2 (s^2 , d^2)	14 000	fixé
1 - 3	R^2 (fs, fd)	184	fixé
	R^3 (fs, df)	967	fixé
2 - 3	R^2 (ds, d^2)	- 14 599	963
2 - 3	R^2 (fs, fd)	233	120
	R^3 (fs, df)	1 629	R^3/R^2 fixé
2 - 4	R^1 (ds, fp)	- 4 900	177
	R^3 (ds, pf)	- 1 097	320
3 - 4	R^1 (d^2 , fp)	0	fixé
	R^3 (d^2 , fp)	0	fixé

TABLE 22 CONFIGURATIONS 4F12(5D+6S)2 + 4F13 6P .

L CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12D5 + F13P	PORTE EN F12S2 F12D5 F13P
------------	-----------	------------	------------	-----------	-----------------------------------	------------------------------

MATRICE J=

35420			0/0		62 *3F2 3D2	100
39026			0/0		67 3F3 3D3	98
40743			0/0		97 *3F2 1D2	48
42361			0/0			39
47999			0/0		47 F12 3P0	50 3

MATRICE J=1

28304			0.513		74 *3F4 3D3	100
31809			0.507		40 *3H4 3D3	100
34879	34984.9	106	0.814	0.887	48 *3F2 3D2	99 1
35694	35806.8	113	0.940	0.877	42 *3F2 3D1	97 3
36909			0.705		25 3F3 3D2	99
38012	37916.1	-96	0.646	0.58	64 5/2 3/2	34 65
38476	38533.6	58	2.238	1.81	74 *3F2 3D3	99 1
38889	38990.6	102	1.220	1.37	34 3F3 3D3	86 13
40071	40063.5	-8	1.332	1.37		20 2
40968	40988.6	20	0.691	0.66	45 3F3 1D2	75 8
41466			1.259		61 *3F2 1D2	67
42860			0.940			11
44941			0.941			21 1
45093			0.615			72 3
47500			0.585			4

MATRICE J=2

25658	25498.8	-159	0.941	0.89	74 *3F4 3D2	1 99
26832			0.760		71 F12 3F2	95 1
27407	27294.8	-112	1.064	1.045	33 3H5 3D3	98
29270	29285.7	16	0.974	0.96	54 7/2 3/2	45 55

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12DS + F13P	PURETE EN % F12S2 F12DS F13P
29921	29967.1	46	0.997	1.05	24 *3F4 303	72 26
31023	31090.1	67	0.983	1.03	33 *3F4 102	89 6
32639	32500.3	-138	1.029	0.98	36 *3H4 302	90 6
33101	33096.8	-4	0.694	0.73	30 *3H4 303	98 2
34376	34404.3	28	0.790	0.790	50 *3F2 301	96 3
35055	35004.0	-51	1.167	0.91	37 5/2 1/2	1 76 22
35365	35274.5	-90	0.923	1.15	36 *3F2 302	3 64 33
35840	35833.6	-6	1.142	1.05	15 *3H4 102	73 2
36369	36394.6	25	0.998	1.02	25 3F3 301	67 30
37006	37151.1	145	1.309	1.273		30 2
37375	37482.7	107	0.954	1.11	32 3F3 302	85 10
37789	37841.2	52	1.446	1.387	32 3F3 303	94 4
38926	39000.7	75	1.191	1.16	38 *3F2 303	83 3
39068	39196.7	129	1.254	1.03		4 13 1
39557	39514.6	-43	0.991	1.247	19 F12 102	41 18 27
39611	39828.6	218	0.965		54 5/2 3/2	40 27 26
40250	40232.3	-18	1.160	1.16	64 3F3 102	1 65 14
41285			1.357			2
41341			1.132			2 28 1
41668			0.991		57 *3F2 102	4 70 3
43327			1.250			1 5
43653			1.038		68 *1G4 303	2 80 2
43819			1.066			2 16
44342			0.817			5
45705			0.989			12 1
46204			0.920		38 *1G4 302	79 4
46972			0.730			17
47109			0.951		66 *1G4 102	72 1

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12DS + F13P	PURETE EN % F12S2 F12DS F13P
7770			1.196			8
MATRICE J=3						
21679	21608.3	-71	1.095	1.10	69 *3H6 3D3	98 2
25293	25257.5	-36	1.268	1.225	76 *3F4 3D1	94 6
26007	25980.0	-27	1.275	1.26	55 7/2 1/2	45 55
26418	26578.8	161	1.084	1.069	94 F12 3F3	94
26761	26837.6	76	1.087	1.085	51 *3F4 3D2	78 21
27727	27702.4	-25	1.123	1.10	37 3H5 3D2	90 9
28346	28267.9	-79	1.096	1.11	37 *3F4 3D3	1 94 5
29503	29425.0	-78	1.080	1.05	60 7/2 3/2	49 48
30732	30684.4	-47	1.041	1.05	38 3H5 3D3	90 9
31053	31036.6	-16	1.069	1.08	46 *3H4 3D1	96 1
31749	31745.5	-4	0.919	0.95	30 *3F4 1D2	75 23
33442	33398.7	-44	1.008	1.07	18 3H5 1D2	93 4
33541	33565.1	24	0.987	0.88	45 *3F3 3D1	95 2
34352	34398.6	46	0.992	0.98	18 *3H4 3D2	82 17
34913	34913.8	1	1.353	1.377		2
35283	35380.1	97	0.923	0.92	28 *3F2 3D2	80 18
35692	35753.7	61	1.177	1.15	37 *3F3 3D2	93 7
35972	36041.0	69	1.062	1.145	33 *3F2 3D1	92 4
36222	36132.1	-90	0.916	0.915	30 5/2 1/2	57 42
36945	36869.0	-76	1.128	1.11	44 3F3 3D3	89 7
37764	37957.7	192	1.050	0.915		28 2
38047	38261.0	214	0.806		25 *3H4 3D3	77 3
38484	38582.9	99	1.094	1.00		33 5
38883	38791.9	103	0.987		26 3F3 1D2	66 9
39412	39554.0	142	1.052	1.10	21 *3H4 1D2	55 17
39870	37893.8	24	0.948	1.006	51 5/2 3/2	60 31

F CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12DS + F13P	PURETE EN % F12S2 F12DS F13P
40317	40359.7	43	1.133		68 *3F2 102	72 16
41044			1.136		44 *3F3 102	74 8
41375			1.113			15
41813	41846.6	34	1.199			1
42717			1.231		41 *1G4 303	95 2
43185			1.015			1
43423			1.164			4
43796			1.129			5
44216			0.962			29 1
44293			0.837		52 *1G4 302	72 1
45078			1.012		37 *1G4 301	76 8
45944			0.976			9
46568			1.157			6
46804			1.000			41 1
47079			1.042			55 1
47921			1.022			2

MATRICE J=4

17972	17974.3	2	1.155	1.175	61 F12 3F4	93 4
18282	18291.3	9	1.253	1.25	64 *3H6 302	4 95
22396	22308.9	-87	1.246	1.24	26 *3H6 102	96 2
23771	23803.3	32	1.088	1.08	30 *3H6 303	89 10
25007	24932.0	-75	0.941		57 F12 3H4	95 1
25765	25696.2	-69	1.267	1.25	56 *3F4 301	97 2
26470	26574.7	104	1.078	1.057	45 7/2 1/2	55 45
27008	27009.4	2	1.169	1.19	20 *3F4 302	80 19
27377	27254.4	-123	1.106	1.084	26 3H5 301	83 15
29087	29183.4	97	1.140	1.15	53 *3F4 303	81
30264	30377.2	113	1.086	1.12	26 3H5 302	91 8

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12D5 + F13P	PURETE EN % F12S2 F12D5 F13P
30597	30508.8	-88	1.273	1.25	52 *3F4 102	40 19
30972	30840.7	-131	1.310	1.29		32 8
31111	31135.7	24	0.952	0.91	38 3H5 303	93 2
31904	31900.0	-4	1.164	1.17	35 7/2 3/2	12 25
33271	33391.6	120	1.026	1.03	26 3H5 102	7 19 8
33756	33665.9	-90	0.999	0.908	35 3F3 302	9 87 2
33866			0.975		45 F12 1G4	74 16 1
34242	34307.5	66	0.900	0.980	35 *3H4 302	97 1
34942	34871.4	-70	1.061	1.05	35 *3H4 303	96 3
35392	35122.9	-269	1.176			2 6
35910	35966.4	57	1.196	1.21	36 3F3 303	97 1
36559	36547.9	-11	0.928	0.89	33 3F3 301	98 1
37589	37581.4	-8	1.048	1.06	39 *3F2 302	93 4
37812	37775.2	-37	1.060			63 5
38223	38093.5	-130	1.001	1.06	23 *3F2 303	77 4
38427	38361.2	-66	1.072	1.035	35 5/2 3/2	1 34 20
39114	39025.6	-89	1.023		40 *3H4 102	62 2
39256	39162.1	-94	1.067	1.05	79 3F3 102	53 3
39529	39636.5	107	1.062		37 5/2 3/2	41 37
39926	39843.0	-83	1.095	1.11		46 22
40799			1.092			8 1
41410	41166.4	-244	1.165			11
41625			0.927		36 *3F2 102	73
42244			1.043			10
42661			0.807		65 *1G4 301	97
43163	43295.2*	132	1.173			1 9
43494			1.105			26
43982			1.078			58 2

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12D5 + F13P	PURETE EN n/O F12S2 F12D5 F13P
44634			1.047		35 *1G4 3D3	53 2
44884			1.102		34 *1G4 3D2	42 3
45351			1.238			4
45522			0.979			2
45864			1.058			3
46362			1.066			1 1
47089			1.047			2
47546			0.970		78 *1G4 1D2	72 1
47842			0.956			16

MATRICE J=5

16610	16567.5	-42	1.381	1.374	64 *3H6 3D1	100
20705	20619.0	-86	1.048		85 F12 3H5	85 11
20939	21022.0	83	1.173	1.178	34 *3H6 3D2	11 88
23866	23768.9	-97	1.066	1.04	59 *3H6 3D3	99 1
25070	25014.7	-55	1.180	1.185	44 *3H6 1D2	92 3
26200	26188.4	-11	1.201	1.20	43 *3F4 3D1	97 2
26901	26867.8	-34	0.953	0.94	42 *3F4 3D2	99
28353	28276.3	-77	1.187	1.21	81 *3F4 3D3	94 6
28745	28875.1	130	1.194	1.18	38 7/2 3/2	65 34
30267	30197.3	-69	0.966	0.950	49 3H5 3D1	98 2
30597	30627.6	31	1.118	1.125	38 *3F4 1D2	69
31745	31726.4	-19	1.059	1.055	42 3H5 3D3	85 14
31978	31926.0	-52	1.165	1.175		63 32
32411			0.844		39 *3H4 3D1	100
32953	33036.6	84	1.290	1.265		4 1
34244	34157.6	-86	1.042	1.06	57 *3H4 3D2	92 2
34893	34580.0	-313	1.026	1.055	65 3H5 1D2	91
35401	35227.6	-174	1.166			1 5

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12D5 + F13P	PURETE EN n/O F12S2 F12D5 F13P
35875	35772.8	-102	1.098	1.12	39 *3H4 3D3	97 2
35949			1.227		41 3F3 3D2	99
37752			1.084		40 3F3 3D3	75
38204	38200.3	-4	1.020			62
38640			1.063		46 *3H4 1D2	27
39166	39092.2	-73	1.096			8
40000	39968.7	-32	1.086		43 *3F2 3D3	96
40478			1.033		67 3F3 1D2	66
40836			1.090			4
41188			0.903		82 *1G4 3D1	78
41439	41511.6	73	1.076			28
41611	41541.8	-69	1.151			13
42298	42187.9	-110	1.052			3
42719			1.074			4
43159			1.034		78 *1G4 3D2	98
43794	43896.0	102	1.142			4
43986	43899.1	-87	1.106			2
44669			1.104			17
45039			1.102		91 *1G4 3D3	84
45548			1.128			3
46094			1.122			2
47007			0.960			19
47236			0.911			24
47452			0.960		93 *1G4 1D2	35
47944			1.093			5

MATRICE J=6

12523	12457.0	-66	1.165	1.165	96 F12 3H6	98
19513	19526.8	14	1.312	1.313	44 *3H6 3D2	100

L CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12DS + F13P	PURETE EN n/O F12S2 F12DS F13P
22237	22355.4	119	1.070	1.085	55 *3H6 301	100
23980	23904.4	-76	1.124	1.125	64 *3H6 303	100
26529	26478.3	-30	1.135		48 *3H6 102	99
26738	26709.4	-29	1.198	1.19	55 *3F4 302	99
27530	27598.6	68	0.955	0.955	67 3H5 301	99
28262	28096.1	-166	1.107		45 *3F4 303	100
30443	30361.1	-82	1.118		67 3H5 302	99
31374	31323.7	-50	1.075		43 *3F4 102	85
32416	32289.2	-127	1.131		80 3H5 303	100
32922	32917.5	-5	1.200			3
33138	33150.5	13	1.015		38 *3H4 302	99
34704			1.046		80 3H5 102	80
35786	35979.9	193	1.149			14
36070	36145.3	76	1.122	2	63 *3H4 303	93
37210			0.986		64 *3H4 102	85
37930	37968.8	38	1.137			3
38713	38537.9	-175	1.180		52 3F3 303	97
39136	39149.1	13	1.017			4
39573	39713.0	140	1.180			5
40340	40357.5	17	1.155			3
41073			1.268			5
41915	41918.6	3	1.021		88 *1G4 302	95
42236			1.105			1
42581			1.058			3
42951	42921.8	-29	1.053			4
43323			1.043			2
43928			1.060			1 2
44959			1.102		95 *1G4 303	97

E CALC.	E OBS.	Δ E	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F1205 + F13P	PURETE EN n/O F1252 F1205 F13P		
45238			1.083			1	5	
45531			1.106				5	
46107			0.967				2	
46508			1.010		91 *1G4 102	7	73	
46781			1.015		80 F12 116	81	3	
46966			1.101			7	14	

MATRICE J=7

19626	19619.1	-7	1.028	1.02	86 *3H6 3D1		100	
21922	22052.4	130	1.215	1.209	79 *3H6 3D2		100	
23964	23961.6	-2	1.190	1.20	83 *3H6 3D3		100	
26133	26256.2	124	1.132	1.127	48 *3H6 102		87	
28069	28095.3	26	1.065		51 3H5 3D2		99	
29204	28974.9*	-231	1.199		67 *3F4 3D3		99	
31885	31836.9	-48	1.084		83 3H5 3D3		94	
32611	32590.1	-20	1.113		85 3H5 102		93	
33055	33182.0	127	1.198				3	
34621	34685.7	65	1.120				6	
35046	35195.1	149	1.114		93 *3H4 3D3		99	
36883	36805.7	-78	1.117				3	
39050	38981.5	-69	1.243					
40226	40423.0	197	1.137					
40895			1.115				7	
41517			0.950				1	
42643			1.194					
43865			1.125				1	
43917	43928.0	11	1.125		98 *1G4 3D3		96	
44556			1.071				4	
45674			1.122					

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12DS + F13P	PURETE EN n/O F1252 F12DS F13P
46149			1.081			1
47893			1.056			2

MATRICE J=8

16642	19682.9	41	1.147	1.09	91 *3H6 3D2	100
22917	23024.3	108	1.186	1.21	89 *3H6 3D3	97
23958	24059.0	101	1.169	1.147	90 *3H6 1D2	94
29568	29671.4	104	1.148		98 3H5 3D3	100
33192			1.054			2
34741	34766.8	26	1.210			
36250			1.117			1
40817			1.219			
41729			1.100			3
43490			1.076			1
44243	44129.1	-114	1.178			
45462			1.119			
45990			1.123			

MATRICE J=9

20243	20465.8	223	1.221	1.223	100 *3H6 3D3	100
34221			1.127			
36971			1.200			
42892			1.119			
46308			1.109			

MATRICE J=10

35384			1.196			
40663			1.102			

La pureté des vecteurs propres dans les couplages étudiés est la suivante :

Couplage :	$J_1 J_2$	$J_1 L_2$	LS
	$((f^{12}) * [S_1 L_1] J_1, (ds) [S_2 L_2] J_2)$	$((f^{12}) * [S_1 L_1] J_1, (ds) L_2) S_2 K)$	
	+	+	
	$((f^{13}) j_1, p j_2)$	$((f^{13}) j_1, p) \frac{1}{2} K)$	
Pureté :	56 %	60 %	39 %

Les fonctions $(*[S_1 L_1] J_1)$ sont les fonctions propres du coeur réel f^{12} . La configuration f^{13}_p est plus proche du couplage $j_1 j_2$ que de $j_1 L_2$, avec une pureté de 47 % contre 40 %. La colonne "désignation", du tableau indique la plus grande composante en couplage $*J_1 J_2$ des vecteurs propres de $f^{12}_{ds} + f^{13}_p$ étudiés isolément. Dans la mesure où le mélange de $f^{12}_{ds} + f^{13}_p$ avec $f^{12}_{s^2}$ et $f^{12}_{d^2}$ est faible, la désignation des niveaux est justifiée. Les figures 14 et 15 représentent la structure des niveaux profonds de f^{12}_{ds} , construits sur le terme parent 3H_6 de f^{12} .

Le premier pourcentage des vecteurs propres, dans les couplages $*J_1 L_2$ et $*J_1 J_2$ étudiés plus haut, apparaît au-dessus de chaque niveau. Les multiplets, construits en partant des termes 3D_1 , 3D_2 et 3D_3 , 1D_2 de ds , sont réellement plus imbriqués les uns dans les autres que ne le laissaient prévoir les désignations de N. SPECTOR [48]. Pour le couplage $*J_1 L_2$, il y a une très nette compétition entre les niveaux des termes ${}^3(6)$ et ${}^3(7)$ dont les centres de gravité sont situés à la même hauteur. Tous les niveaux sans facteur de Landé g mesuré, ont été trouvés par J. SUGAR à l'aide du programme de différence COMBO, aux positions prévues par nos calculs avec une erreur de $\pm 150 \text{ cm}^{-1}$. Les niveaux observés de $J \geq 6$ donnent des transitions fortes avec les niveaux élevés de f^{12}_{sp} et f^{12}_{dp} .

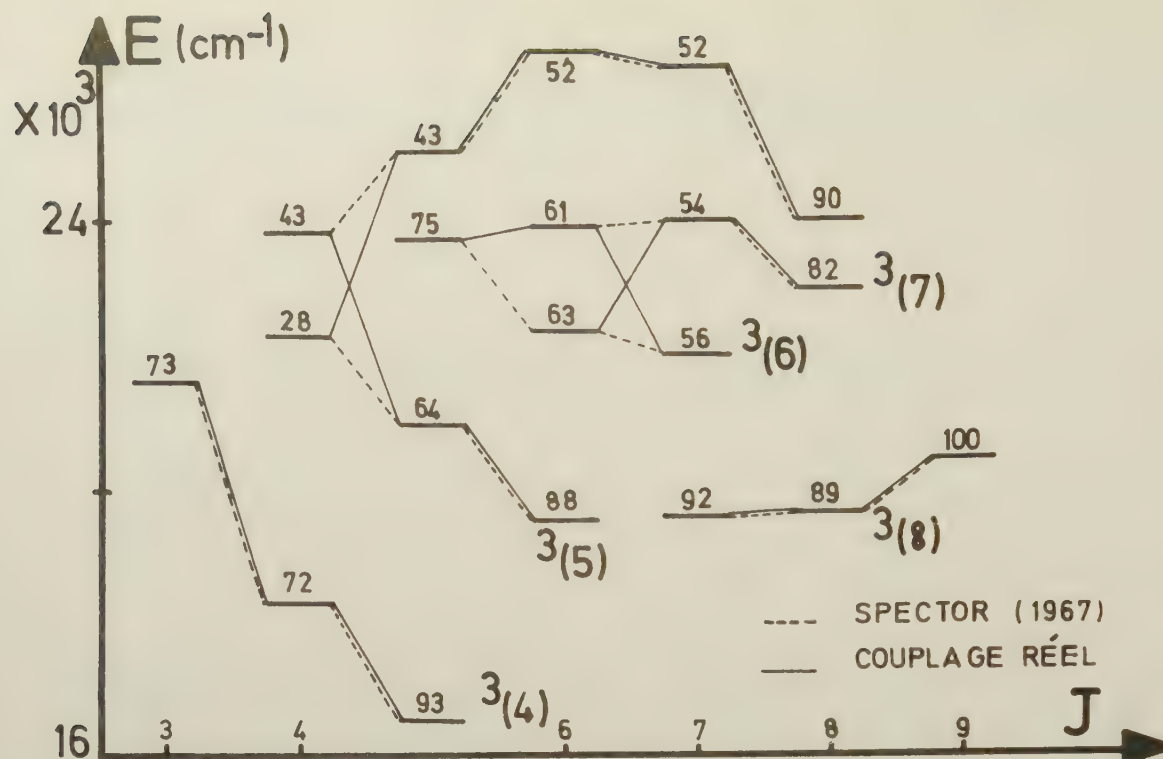


fig. 14

- Niveaux profonds de $f^{12}(^3H_6) 5d6s$ en couplage $*J_1 L_2$ -

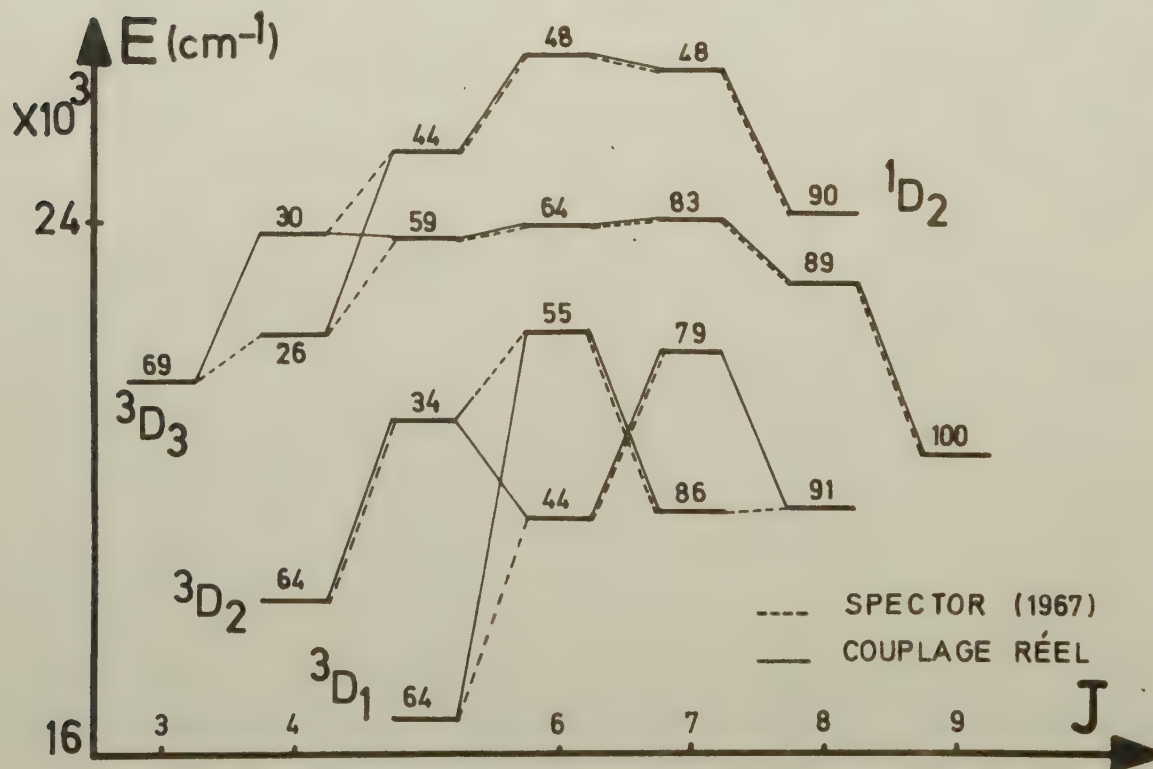


fig. 15

- Niveaux profonds de $f^{12}(^3H_6) 5d6s$ en couplage $*J_1 J_2$ -

4 - Liste des niveaux pairs

Les noms, énergies et valeurs des facteurs de Landé g mesurés des niveaux pairs de Tm II sont donnés dans la liste 3.

La figure 16 représente le diagramme en énergie de ces niveaux et la structure des multiplets dans les couplages intermédiaires étudiés. L'accroissement de la liste des niveaux pairs au-delà de 41000 cm^{-1} , est fonction de l'extension de la liste des niveaux impairs; mais, l'absence de vérifications possibles par l'effet Zeeman des niveaux trouvés par différence, (raies faibles ou invisibles sur les plaques prises avec le tube sans électrodes) confère à ce travail un aspect plus statistique que spectroscopique.

III - 3 - CONFIGURATIONS IMPAIRES

$$1 - 4f^{13}_{6s} + 4f^{13}_{5d}.$$

Les éléments de matrice des opérateurs Q et A de f^{13}_d sont donnés par E.U. CONDON et G.H. SHORTLEY [16].

L'interaction entre les configurations, f^{13}_s et f^{13}_d , introduit deux intégrales, R^2 (fs, fd) et R^3 (fs, df), dont les coefficients angulaires sont les suivants :

$$\begin{aligned} \langle (f^{13}_s) {}^1F \mid Q \mid (f^{13}_d) {}^1F \rangle &= \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{R^2}{5} - \frac{2}{7} R^3 \right) \\ \langle (f^{13}_s) {}^3F \mid Q \mid (f^{13}_d) {}^3F \rangle &= \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{R^2}{5} \end{aligned}$$

La configuration f^{13}_d (9 niveaux observés sur 20) a d'abord été étudiée séparément de f^{13}_s . L'écart $\overline{\Delta E}$ de 225 cm^{-1} , obtenu avec le jeu de paramètres de la table 9, n'étant pas significatif, nous avons introduit l'interaction de configuration avec f^{13}_s . Le nombre, égal à 4, des niveaux de f^{13}_s étant plus petit que le nombre de paramètres qui décrit cette configuration, nous avons dû fixer dans les variations les valeurs des intégrales R^2 et R^3 .

LISTE 3

NIVEAUX PAIRS DE TM II.

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F12 6S2	3H	6	12457.29	1.165
.. ..	3F	4	17974.30	1.175
4F12(*3H6) 5D6S(3D)	(6.1)	5	16567.47	1.374
		7	19619.08	1.02
		6	22355.44	1.085
.. ..	(6.2)	4	18291.36	1.25
		6	19526.82	1.313
		8	19682.97	1.09
		5	21021.99	1.178
		7	22052.40	1.209
4F12 6S2	3H	5	20619.05	
4F12(*3H6) 5D6S(3D)	(6.3)	9	20465.79	1.229
		3	21608.27	1.10
		4	22308.83	1.24
		8	23024.29	1.21
		5	23768.84	1.04
		6	23904.43	1.125
		7	23961.59	1.20
4F12 6S2	3H	4	24932.00	
4F12(*3H6) 5D6S(1D)	(6.2)	4	23803.28	1.08
		8	24059.09	1.147
		5	25014.76	1.185
		7	26256.26	1.127
		6	26478.28	
4F12(*3F4) 5D6S(3D)	(4.1)	3	25257.53	1.225
		4	25696.21	1.25
		5	26188.47	1.20
4F13(2F7/2) 6P	(7/2.1/2)	3	25980.02	1.26
		4	26574.66	1.057
4F12 6S2	3F	3	26578.77	1.069
4F12(*3F4) 5D6S(3D)	(4.2)	2	25498.77	0.89
		3	26837.59	1.085
		6	26709.43	1.19
		5	26867.71	0.91
		4	27009.39	1.19
4F12(3H5) 5D6S(3D)	(5.1)	4	27254.42	1.084
		6	27598.56	0.955
		5	30197.45	0.95

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F12(*3F4) 5D6S(3D)	(4,3)	6	28096.17	
		3	28267.88	1.11
		5	28276.32	1.21
		7	28974.91	
		4	29183.39	1.15
		2	29967.17	1.05
4F13(2F7/2) 6P	(7/2,3/2)	5	28875.13	1.18
		2	29285.71	0.96
		3	29424.97	1.05
		4	31899.99	1.17
4F12(3H5) 5D6S(3D)	(5,2)	3	27702.42	1.10
		7	28095.32	
		6	30361.07	
		4	30377.16	1.12
		5	31926.81	1.175
4F12(*3F4) 5D6S(1D)	(4,2)	4	30508.76	1.25
		5	30627.58	1.125
		2	31090.10	1.03
		6	31323.73	
		3	31745.50	0.95
4F12(3H5) 5D6S(3D)	(5,3)	2	27294.79	1.045
		8	29671.40	
		3	30684.43	1.05
		4	31135.73	0.91
		5	31726.40	1.055
		7	31836.90	
		6	32289.22	
4F12(*3H4) 5D6S(3D)	(4,1)	3	31036.61	1.08
..	..	2	32500.24	0.98
	(4,2)	6	33150.48	
		5	34157.64	1.06
		4	34307.54	0.98
		3	34398.69	0.98
4F12 5D2		4	30840.77	1.29
		6	32917.50	
		5	33036.56	1.265
		7	33182.00	
4F12(3H5) 5D6S(1D)	(5,2)	7	32590.13	
		4	33391.56	1.03
		3	33398.69	1.07
		5	34580.74	1.055
4F12 5D6S		2	33096.78	0.73
		3	33565.11	0.88
		4	33665.98	0.908
		2	34404.27	0.79
		4	34871.38	1.05

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F12	502	7	34685.75	
		8	34766.81	
		3	34913.84	1.377
		4	35122.91	
		5	35227.68	
		6	35979.94	
4F13(2F5/2)	6P	2	35004.01	0.91
		3	36132.10	0.915
4F12	506S	1	34984.88	0.887
		7	35195.12	
		2	35274.44	1.15
		3	35380.14	0.92
		3	35753.73	1.152
		5	35772.82	1.12
		1	35806.78	0.877
		2	35833.62	1.05
		4	35966.42	1.21
		3	36041.02	1.145
		6	36145.31	
		2	36394.64	1.02
		4	36547.85	0.89
		3	36869.00	1.11
		2	37482.70	1.11
		4	37581.46	1.06
		2	37841.23	1.387
		4	38093.55	1.06
		5	38200.36	
		3	38261.05	
		1	38533.60	1.81
4F12	502	7	36805.71	
		2	37151.10	1.273
		4	37775.23	
		3	37957.72	0.915
		6	37968.83	
		4	38361.25	1.035
4F13(2F5/2)	6P	1	37916.10	0.58
		2	39828.63	
		4	39843.25	1.11
		3	39893.86	1.006
4F12	506S	6	38537.96	
		1	38990.65	1.37
		3	38991.95	
		2	39000.75	1.16
		4	39025.63	
		4	39162.06	1.05
		3	39554.04	1.10
		4	39636.52	
		5	39968.72	

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
HF 12	SD2	3	38582.96	1.00
		7	38981.51	
		5	39072.23	
		6	39149.05	
		2	39176.68	1.03
		2	39514.67	1.247
		6	39713.04	
		1	40063.47	1.37
		6	40357.52	
		7	40423.03	
HF 12	SD6S	2	40232.30	1.16
		3	40359.76	
		1	40988.57	0.66
		6	41918.58	
HF 12	SD2	4	41166.36	
		5	41511.65	
		5	41541.81	
		3	41846.64	
		5	42187.96	
		6	42921.77	
		4	43295.21	
		5	43896.02	
		5	43899.14	
HF 12	SD6S	8	44129.13	
		7	43928.00	
		2	40056.34	1.23
		2	40505.82	1.135
		3	40545.26	1.010

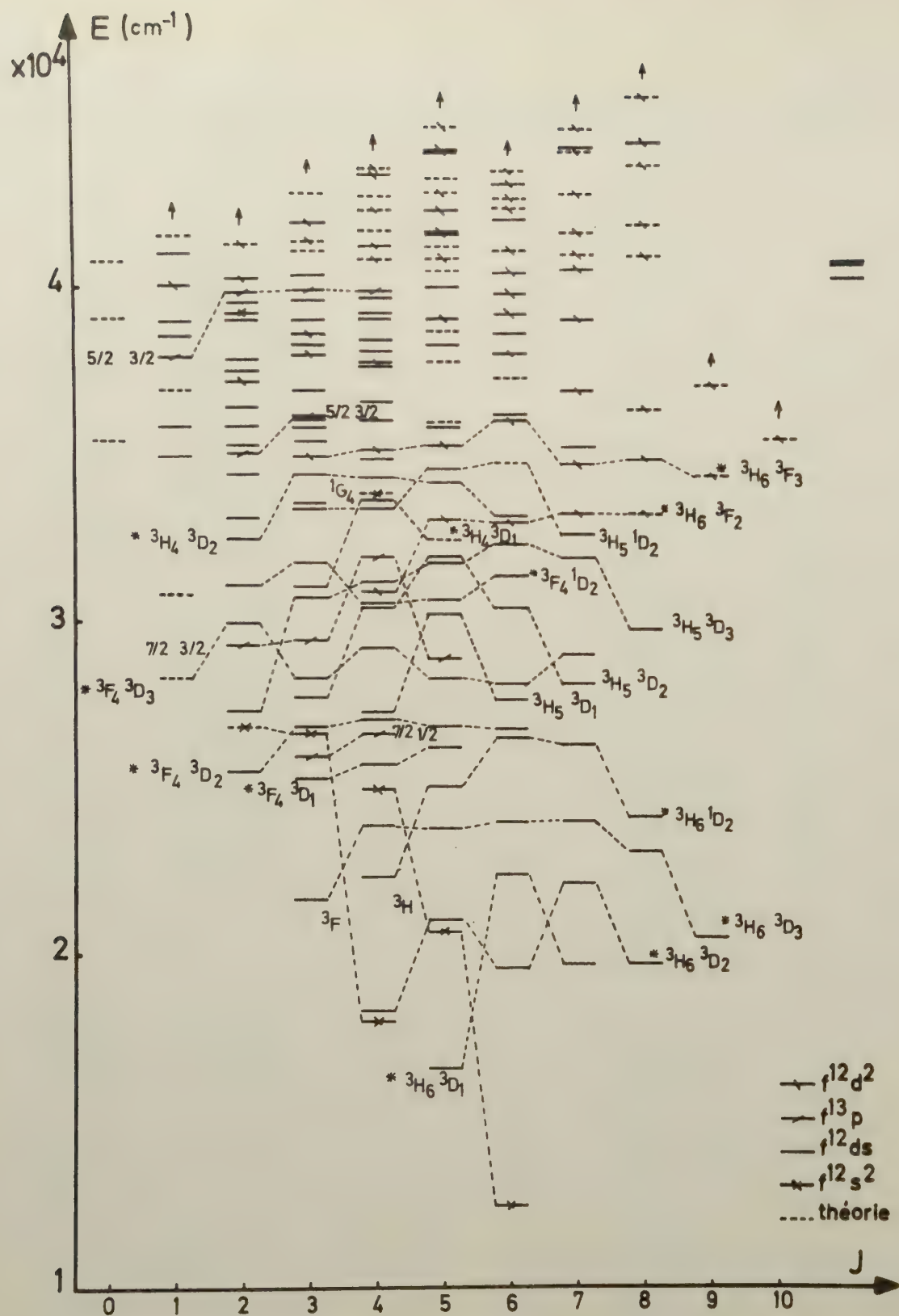


fig. 16

- Diagramme d'énergie des niveaux pairs de Tm II -

Le mélange de ces deux configurations, étant inférieur à 1 %, aucune réduction significative $\overline{\Delta E}$ n'est observée. En désespoir de cause, un hamiltonien effectif a été ajouté à l'hamiltonien de $f^{13}d$. Il tient compte d'une partie des effets d'interaction d'ordre plus élevé, en considérant tous les opérateurs scalaires à deux particules qui agissent sur l'orbite des électrons. Cet opérateur effectif, décrit par S. FENEUILLE et N. PELLETIER-ALLARD [51], se traduit, dans nos calculs, par quatre paramètres supplémentaires $L^{k'}(ll')$. Les formules des coefficients angulaires des $L^{k'}(ll')$ sont celles des intégrales $F^k(fd)$ et $G^k(fd)$, en remplaçant les éléments de matrice réduits $(l||C^{(k)}||l')$, par la valeur 1 et en choisissant les valeurs k' différentes de k , telles que :

$$|l - l'| \leq k' \leq l + l' \quad \text{et} \quad l + k' + l' \text{ impair.}$$

Les paramètres L^1 , L^3 , L^2 et L^4 absorbent tous les effets de la théorie linéaire de l'interaction de configurations lointaines, décrite habituellement par les paramètres E_L et E_S , respectivement proportionnels à $L(L+1)$ et $S(S+1)$. Les jeux de paramètres de la table 9 montrent la diminution progressive de l'écart $\overline{\Delta E}$ au fur et à mesure que les $L^{k'}$ sont laissés libres. Il faut noter, que l'introduction successive de L^3 , L^2 et L^4 abaisse le paramètre L_1 ($12\sqrt{70} L^1$), équivalent à E_L , de la valeur -37 cm^{-1} à 0.

D'autre part, les intégrales $G_1(fd)$ et ζ_d , qui avaient pris des valeurs différentes du jeu $f^{13}d$ avec le seul paramètre L_1 , retrouvent des valeurs voisines avec l'hamiltonien effectif complet. Cet exemple ne permet pas, pour le moment, de conclure à la nécessité d'introduire l'hamiltonien effectif de S. FENEUILLE dans la description des effets linéaires de l'interaction lointaine. Le nombre de niveaux est égal au nombre de paramètres, ce qui explique les écarts peu significatifs entre les énergies calculées et observées du tableau 23. Néanmoins, toutes les fois que nous avons introduit les paramètres $E_L L(L+1)$ et $E_S S(S+1)$ dans les calculs paramétriques de Tm II, aucune baisse sensible de $\overline{\Delta E}$ n'a été observée. Mais, que la

TABLE 9 - Etude paramétrique de $f^{13}(d + s)$ -

Paramètres	f^{13}_d	$f^{13}(d + s)$	$H f^{13}(d + s) + H_e(f^{13}_d)$				Final
			(1)	(2)	(3)	(4)	
T		3970(143)	3970(103)	3970(117)	3970 (87)	3970(29)	3971(24)
D	25208(90)	25511(164)	21701(148)	21570(142)	21531(107)	21567(35)	21568(29)
$F_2(f_d)$	137 (7)	137 (7)	126 (7)	139 (7)	142 (5)	139 (2)	140 (2)
$F_4(f_d)$	10 (2)	10 (2)	12 (2)	10 (2)	9(1,5)	11 (1)	11(0,6)
$G_1(f_d)$	174(57)	144 (43)	191 (38)	147 (38)	167 (30)	161(10)	162 (7)
$G_3(f_d)$	34	34	34	34	34	34	34
$G_5(f_d)$	3	3	3	3	3	3	2,8
$G_3(f_s)$		200(197)	200(142)	200(163)	200(121)	200(40)	202(33)
$\zeta_f(f^{13}_s)$		2489 (58)	2489 (42)	2489	2489	2489	2489
$\zeta_f(f^{13}_d)$	2500	2500	2500	2500	2500	2500	2500
ζ_d	557(93)	556 (83)	438 (81)	573 (69)	540 (53)	556(18)	552(12)
$R^2(f_s, f_d)$		750	750	750	750	750	750
$R^3(f_s, df)$		1260	1260	1260	1260	1260	1260
$L_1 = \alpha L (L+1)$ $= E_L$			- 37 (17)	- 4 (8)	- 1 (6)	0 (2)	0
L^3			0	0	- 22 (11)	- 18 (4)	- 18 (3)
L^2			0	0	0	- 35 (7)	- 33 (6)
L^4			0	- 6 (5)	- 5 (4)	- 5 (1)	- 5 (1)
ΔE	225	201	145	169	126	41	30
N	9	13	13	13	13	13	13

TABLEAU 23 CONFIGURATION 4F13(5D+6S) .

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN D/O		
					LS	JJ	J _I
MATRICE J=0							
26909			0/0		100 3P0	100 85/2	100 82(1/5)
MATRICE J=1							
22141	22141.9	1	1.331	1.325	-78 3P1	72 A5/2	71 A2(3/2)
30189			0.685		80 3D1	86 85/2	78 82(3/2)
34108			0.984		86 1P1	-76 83/2	-52 82(1/2)
MATRICE J=2							
8746	8769.7	23	0.667	0.667	100 3F2		
17622	17624.7	2	1.470	1.48	91 3P2	75 A3/2	98 A2(3/2)
21980	21978.8	-1	1.019	1.02	58 1D2	76 A5/2	98 A2(5/2)
29758			0.988		-41 1D2	-86 83/2	72 82(3/2)
31448			0.857		-63 3F2	-86 85/2	72 82(5/2)
MATRICE J=3							
202	236.9	35	1.049	1.035	59 3F3		
8981	8957.5	-24	1.034	1.055	-59 1F3		
21713	21713.7	1	1.251	1.22	70 3D3	-84 A3/2	81 A2(5/2)
24857			1.074		34 1F3	79 A5/2	77 A2(7/2)
32397			0.790		87 3G3	67 83/2	99 82(7/2)
33551			1.050		-62 1F3	64 85/2	94 82(5/2)
MATRICE J=4							
34	0.0	-34	1.250	1.25	100 3F4		
22456	22457.5	1	1.123		47 3F4	-93 A3/2	51 A2(7/2)
23524	23524.1	0	1.099		44 3F4	93 A5/2	-51 A2(9/2)
28694			0.831		-85 3H4	-94 83/2	-98 82(9/2)
32931			1.047		-56 3G4	95 85/2	98 82(7/2)
MATRICE J=5							
20232	20228.8	-3	1.022	1.020	55 3H5	95 A3/2	97 A2(11/2)

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN D/O		
					LS	JJ	JL
24274	24273.2	-1	1.173	1.18	86 3G5	95 A5/2	97 A2(9/2)
30504			1.038		-45 1H5	99 B5/2	100 B2(9/2)
MATRICE J=6							
21133	21133.7	1	1.167	1.167	100 3H6	100 A5/2	100 A2(11/2)

valeur de E_L , identique à $12\sqrt{70} L^1$, soit justement nulle, dans un traitement plus complet des interactions lointaines, n'est certainement pas une coïncidence. C'est, peut-être, une des raisons pour lesquelles l'introduction du seul paramètre E_L n'a donné aucune diminution de l'écart quadratique moyen $\overline{\Delta E}$ dans les calculs empiriques de $f^{12}(d+s)^2$ et $f^{12}(d+s)p$.

La pureté des couplages LS, j_1, l_2 et j_1, j_2 dans $f^{13}d$ est respectivement 68, 83 et 25 %. Le premier pourcentage de chaque vecteur est donné dans ces trois couplages.

Aucun des niveaux construits sur le parent ${}^2F_{5/2}$ de f^{13} n'est actuellement observé et nous conservons l'espoir de les trouver pour vérifier le bien fondé de cette étude empirique.

$$2 - 4f^{12}(5d+6s) 6p.$$

Nous avons calculé la configuration $f^{12}dp$ dans le couplage de base $((((f^{12}) S_1 L_1, d) S_2 L_2, p) SL)$. L'assemblage de cette configuration avec celle de $f^{12}sp$ calculée à Jerusalem, introduit quatre paramètres d'interaction $R^2(fs, fd)$, $R^3(fs, df)$, $R^1(ps, dp)$ et $R^2(ps, pd)$ dont les formules angulaires (21 à 24) sont en annexe.

Les dimensions de l'ensemble $f^{12}(d+s)p$ sont données par valeur de J dans le tableau 24.

TABLEAU 24 - Configuration $f^{12}(d+s)p$.

Configurations	Nb. de niveaux	J	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$f^{12}sp$	138		7	18	23	24	23	20	14	7	2		
$f^{12}dp$	626		23	65	95	108	104	88	66	43	23	9	2
$f^{12}(d+s)p$	764		30	83	118	132	127	108	80	50	25	9	2

Les valeurs des paramètres optimisées sur 174 niveaux expérimentaux, sont celles de la table 10.

L'écart $\overline{\Delta E}$ de 97 cm^{-1} représente 0,3 % de l'intervalle en énergie des niveaux observés.

Tous les paramètres obtenus sont en bon accord avec ceux des configurations $f^{13}(d+s)p$ de Yb II, étudiées paramétriquement par Z.B. GOLDSCHMIDT et Y. BORDARIER [52].

La pureté des vecteurs propres sur la base LS de départ est seulement de 23 %. La théorie est comparée à l'expérience dans le tableau 25. Seules les énergies des niveaux calculés inférieurs à 58000 cm^{-1} sont données. Les matrices étant de rang supérieur à 100, il est impossible de les transformer dans une base différente de celle calculée au départ; nous étudierons séparément les couplages intermédiaires de $f^{12}dp$ et $f^{12}sp$. La transformation des 231 vecteurs propres de $f^{12}dp$ de $J \geq 5$ a été effectuée sur la base $((f^{12}) * [S_1 L_1] J_1, (dp) [S_2 L_2] J_2)$ où $[S_1 L_1] J_1$ désigne une fonction propre du coeur réel f^{12} .

La pureté de $f^{12}dp$ (matrices $J \geq 5$) dans ce couplage est de 41 % contre 29 % au couplage LS. Afin de connaître approximativement le nom des niveaux profonds de $f^{12}dp$, le premier pourcentage des vecteurs propres calculés au premier ordre des perturbations est indiqué pour $J \geq 5$. Pour $f^{12}sp$ la pureté des vecteurs propres en couplage $*J_1 J_2$, $((f^{12}) * [S_1 L_1] J_1, (sp) [S_2 L_2] J_2)$, est meilleure : 87 % contre 43 % au couplage LS. Le pourcentage d'appartenance de chaque fonction propre à la configuration $f^{12}sp$ est donné; il montre, ainsi, le grand mélange des deux configurations. Les niveaux, qui possèdent un degré de pureté en $f^{12}sp$ supérieur à 50, seront désignés par les fonctions propres de $f^{12}sp$, calculées au premier ordre de la théorie des perturbations. De cette façon, nous avons

TABLE 10 - Paramètres de $4f^{12}(5d + 6s) 6p$ -

Configurations	Paramètres	Valeurs (cm^{-1})	Ecart-types (cm^{-1})
1 f^{12}_{sp}	T	60 764	222
2 f^{12}_{dp}	D	15 497	347
	$E^1 (f^{12})$	6 834	42
1	$E^2 (f^{12})$	31	E^2/E^1 fixé
	$E^3 (f^{12})$	663	E^3/E^1 fixé
	$E^1 (f^{12})$	6 825	45
2	$E^2 (f^{12})$	31	E^2/E^1 fixé
	$E^3 (f^{12})$	662	E^3/E^1 fixé
	$F_2 (fd)$	186	3
	$F_4 (fd)$	17,3	0,8
	$G_1 (fd)$	171	8
	$G_3 (fd)$	18	2
	$G_5 (fd)$	3,8	0,3
	$F_2 (fp)$	74	4
1	$G_2 (fp)$	6,4	1,4
	$G_4 (fp)$	5,3	2,7
	$F_2 (fp)$	67	4
2	$G_2 (fp)$	11	1,2
	$G_4 (fp)$	8,9	2,2
	$G_3 (fs)$	259	44
	$F_2 (dp)$	322	8

	G_1 (dp)	507	8
	G_3 (dp)	10,2	1,8
	G_1 (sp)	5 392	195
1	ζ_f (f^{12})	2 626	10
2	ζ_f (f^{12})	2 602	13
	ζ_d	1 136	24
1	ζ_p	3 250	31
2	ζ_p	2 585	41
	R^2 (fs, fd)	209	97
	R^3 (fs, df)	1 463	R^3/R^2 fixé
	R^1 (sp, pd)	-11 107	431
	R^2 (sp, dp)	- 8 642	551

N : 175

$$\overline{\Delta E} = 97 \text{ cm}^{-1}$$

TABLEAU 25 CONFIGURATION 4F12(5D+6S)6P .

L	E	Δ E	G	G	COMPOSITION EN JJ		PURETÉ
CALC.	OBS.		CALC.	OBS.	F12 DP	F12 5P	F12 5P
MATRICE J=0							
57943			0/0			99 *3F2 3P2	91
60940			0/0				5
63916			0/0				
64552			0/0				1
68003			0/0				1
MATRICE J=1							
53777			0.314			95 *3F2 3P1	95
57369			1.173				31
57647			1.028			61 3F3 3P2	66
58257			0.649			60 *3F2 3P2	83
59180			0.875				10
60564			0.881				7
60908			0.814				2
61730			0.750				9
63243			0.936			96 *3F2 1P1	19
63601			0.964				9
64447			1.057				13
65260			0.679				1
65998			0.712				7
66585			0.972				4
66942			0.695				39
66993			0.746			96 *1D2 3P1	48
67450			0.927				5
67596			1.797				6
67939			1.104				

E CALC.	E OBS.	Δ E	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ		PURETE F12 SP
					F12 DP	F12 SP	
MATRICE J=2							
49174	49140.9	-34	0.850			95 *3F4 3P2	94
52919			0.830			75 *3F2 3P0	89
53370	53411.9	42	1.142				18
53965	53888.5	-76	0.969			64 3F3 3P1	66
54047			1.047				33
54370			0.949			61 *3F2 3P1	82
55787			0.615			79 *3H4 3P2	92
56784			1.177				10
57451			1.237			61 3F3 3P2	67
57628			0.933				17
58168			0.942			60 *3F2 3P2	94
58771			1.186				3
59212	59156.9	-55	1.152				5
59570			0.914				5
60685			1.077				4
61047			1.035				7
61234	61295.2	61	0.951				12
62124			0.953				12
62313			0.915			91 *3F2 1P1	30
62689			0.987			65 3F3 1P1	31
63126			0.924				2
63885			0.953				6
64211			0.691			93 *1G4 3P2	78
64282			1.088				10
64510			0.947				6
64807			0.948				7
65186			0.855				11

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12 DP	F12 SP	PURETE F12 SP
65809			0.996				9
65900			0.994				9
66189			1.155			92 *102 3P3	83
66353			0.896				4
66731			1.040				6
67119			0.928				4
67177			0.956				7
67361			1.130			62 *102 3P1	55
67457			1.130				16
67807			1.072				18

MATRICE J=3

45338	45338.2	0	1.070	1.05		96 *3F4 3P1	95
49152	49174.0	22	1.134	1.14		94 *3F4 3P2	82
49493	49429.6	-63	1.271	1.25			13
50916	50926.3	10	0.849	0.87		78 3H5 3P2	94
52086	51885.8	-200	1.060				54
52344	52361.9	18	1.071			73 *3H4 3P1	61
52985	53150.8	165	1.098			75 3F3 3P0	95
53433	53494.1	61	1.110			93 *3F4 1P1	29
54110	54354.0	244	1.086			74 3F3 3P1	92
54425	54536.9	112	0.999			67 *3F2 3P1	71
54645	54679.4	35	1.147				10
55092	55138.2	46	1.161				24
55949	56042.1	93	0.912			87 *3H4 3P2	91
56548	56356.9	-191	1.131				8
57319	57253.0	-66	1.139				36
57396	57465.5	70	1.197			72 3F3 3P2	
57598	57547.9	-50	1.098				11

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ		PURETÉ F12 SP
					F12 DP	F12 SP	
57822	57919.1	97	1.144				14
58154	58379.5	225	1.037			70 *3F2 3P2	80
58318	58644.3*	326	1.188				4
58738	58742.9	5	1.033				10
59688	59763.3	75	1.049				21
59868	59815.7	-52	1.123				4
60121	60116.4	-5	1.074				18
60837	60572.9	-264	1.163				8
61157			0.943				37
61242	61300.9	59	0.945			96 *1G4 3P1	57
61590	61600.8	11	1.021				14
61900			0.952				20
62310	62439.7	130	1.036				16
62517			1.029				23
62630	62739.5	109	1.060				15
62930			0.974				6
63142	63206.6	64	0.927				18
63616			0.919				7
64058	64018.6	-39	0.985				12
64267			0.929				11
64591			0.923			96 *1G4 3P2	71
64761			1.056				15
65043	65031.0	-12	0.958				3
65229			1.032				5
65442	65612.8	171	0.984				9
66014			1.042				3
66167			1.061				
66322			0.990				8

E CALC.	E OBS.	Δ E	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12 DP	F12 SP	PURETE F12 SP
66693			0.946				3
67044			1.194			68 *102 3P1	77
67126			0.962				10
67268			0.997				8
67601			1.034				8
67778			0.904				2

MATRICE J=4

43219	43217.6	-1	1.042	1.07		78 *3H6 3P2	95
44272	44237.2	-34	1.294	1.265		73 *3F4 3P0	86
44892	44838.2	-54	1.351	1.365			16
45710	45648.9	-61	1.083	1.07		82 *3F4 3P1	91
47996	48048.2	52	1.012	1.00		87 3H5 3P1	93
49157	49147.6	-10	1.187	1.19		95 *3F4 3P2	93
49911	49792.4	-118	1.263	1.265			2
50826	50766.2	-60	1.182	1.18			10
51460	51227.7	-232	1.043			89 *3H4 3P0	96
51728	51583.1	-145	0.952			84 3H5 3P2	94
52504	52255.9	-248	0.899			89 *3H4 3P1	94
52990	53002.4	12	1.186				18
53685	53576.5	-109	1.153			57 *3F4 1P1	44
53887	53955.6	69	1.177			91 3F3 3P1	65
54357	54419.7	63	1.205				21
54616	54583.8	-32	1.108				17
55871	55833.3	-38	1.070			91 3H5 1P1	43
56201	56352.0	151	1.056			93 *3H4 3P2	59
56437			1.110				30
56898	56714.2	-184	1.111				
57377	57520.5	143	1.214			87 3F3 3P2	81

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12 DP	F12 SP	PURETE F12 SP
57711	57741.7	31	1.166				9
57869	57859.3	-9	1.160				16
58494	58351.9	-143	1.100		54 *3F2	3P2	49
58606			1.071				40
58945	59067.3	122	1.070				12
59310	59297.3	-13	1.029				20
59531	59663.3	132	1.071				6
59793	59889.7	97	0.958		97 *1G4	3P0	41
60038	60004.9	-33	1.061				27
60242	60278.7	36	0.981				14
60641	60539.7	-101	1.111				25
60896	60745.4	-150	1.044		96 *1G4	3P1	66
61161	61114.5	-47	1.067				25
61273	61213.1	-60	1.133				16
61572	61449.1	-123	1.134				3
61875	61790.6	-84	1.029				14
62046	62108.6	62	1.151				15
62329	62348.8	20	1.140				13
62783	62796.7	14	1.015				6
62851	62854.8	4	0.969				15
63162			1.028				19
63470			1.083				4
63894			0.968				9
64194			1.025				7
64743			1.090				5
64888			1.025		99 *1G4	3P2	72
65116			1.019				
65422	65512.6	90	1.088				3

E CALC.	E OBS.	Δ E	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12 DP F12 SP	PURETÉ F12 SP
65569			0.986			6
65821			0.958			6
66108			0.967			4
66411			0.987			1
66522			1.044			2
66711			1.061			3
66910			1.053			3
67425			0.993			3
67567			1.030			1
67811			0.905			2
67981			1.079			4

MATRICE J=5

39832	39863.8	32	1.164	1.189	90 *3H6 3P1	93
43827	43840.8	14	1.103	1.10	85 *3H6 3P2	96
45141	45191.2	50	1.215	1.21	87 *3F4 3P1	86
45982	45987.9	6	1.224	1.22	49 *3H6 3F2	32
46808	46807.3	-1	1.070	1.08	97 3H5 3P0	93
47572	47614.1	42	1.045	1.04	95 3H5 3P1	94
47729	47808.5	80	1.251	1.25	90 *3H6 1P1	32
48860	48807.3	-53	1.237	1.185	98 *3F4 3P2	93
50409	50274.6	-134	1.320	1.29	40 *3H6 3D1	7
50937	51081.5	144	1.246	1.25	26 *3H6 1D2	19
51973	52026.5	54	1.068		86 3H5 3P2	93
52426	52499.1	73	1.041		82 *3H4 3P1	94
52904	52907.9	4	1.123	1.135	30 *3H6 3F3	19
53351	53336.9	-14	1.138		93 *3F4 1P1	23
54461	54317.1	-144	1.150		32 *3H6 3D2	
54596	54523.6	-73	1.093		43 *3F4 3F2	2

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ		PURETÉ
					F12 DP	F12 SP	F12 SP
55142	55167.7	26	1.128		16 *3H6 3F4		5
56169	56066.9	-102	1.111			94 *3H4 3P2	90
56585	56506.4	-78	1.146		25 *3H6 3P1		6
57011	56853.8	-158	1.117		15 *3F4 1F3		3
57144	57050.3	-94	1.054			97 3H5 1P1	52
57671	57599.3	-72	1.212			93 3F3 3P2	73
57683			1.153		22 *3F4 3D1		21
57919	58107.8	189	1.039		18 *3F4 1D2		12
58405	58383.4	-22	1.052		27 *3F4 3D2		2
58493	58538.9	46	1.141		36 3H5 3F2		4
58737	58698.2	-39	1.133		22 *3F4 1D2		2
59701	59607.5	-93	1.066		26 *3F4 3D2		15
60277	60255.4	-21	1.057			89 *3H4 1P1	21
60470			0.979		24 3H5 3F3		16
60649			1.115		17 *3F4 3D3		5
60928	60911.2	-17	1.044		43 3H5 3D1		9
61091	61141.9	51	1.049			95 *1G4 3P1	79
61369	61356.5	-13	1.093		23 *3F4 3D3		8
61664	61650.8	-13	1.043				12
61939	61745.8	-193	1.021		25 *3F4 3P1		4
62127	61924.3	-203	1.176		38 *3H4 3F2		3
62286	62319.4	33	1.065		17 3H5 3D2		3
62504	62550.6	47	1.104		20 3H5 3D3		2
63016			1.082		15 3H5 3F4		3
63570	63533.1	-37	1.087		15 3H5 3F3		3
63652	63605.5	-47	1.065		18 *3F4 3P2		6
64291			1.091		21 3F3 1D2		
64473			1.074		23 *3F4 1F3		4

E CALC.	E OBS.	Δ E CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12 DP	F12 SP	PURETE F12 SP
64763			0.960			27
65021			1.044		92 *1G4 3P2	71
65364			1.000	24 *3F4 1F3		6
65452			1.088	18 *3H4 1D2		2
65735			1.065	18 3H5 3D3		4
65998			0.989	19 3H5 3P1		2
66159			1.119	13 3F3 3F3		6
66344			1.079	16 *3H4 3D2		2
66541			1.084	27 *3F4 1P1		2
67150			1.080	18 3F3 3F3		3
67571			0.992	21 *3H4 3D2		1
67934			1.058	27 3H5 1F3		2

MATRICE J=6

38348	38225.4	-123	1.273	1.273	84 *3H6 3P0	97
39455	39477.6	22	1.082	1.12	83 *3H6 3P1	96
43977	43998.8	22	1.179	1.20	97 *3H6 3P2	95
47859	47927.1	68	1.095	1.095	92 3H5 3P1	91
48238	48195.9	-42	1.172	1.15	52 *3H6 3F2	32
48881	48898.1	17	1.261	1.27	97 *3F4 3P2	92
49266	49195.0	-71	1.182	1.19	97 *3H6 1P1	31
50606	50617.6	11	1.271	1.25	17 *3H6 1D2	1
52012	52056.9	44	1.149		97 3H5 3P2	94
52848	52791.1	-56	1.116	1.125	59 *3H6 3D1	8
53028	53013.8	-14	1.191	1.19	45 *3H6 3F3	5
53863	53896.4	33	1.102		20 *3H6 3P1	7
54812	54710.6	-101	1.129		47 *3H6 3D2	6
55113	55157.6	44	1.065		24 *3F4 1D2	
55421	55476.2	55	1.055		28 *3H6 3D3	28

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ		. PURETE
					F12 DP	F12 SP	F12 SP
55805	55753.8	-51	1.165			96 3H5 1P1	47
55906	55972.4	67	1.133			99 *3H4 3P2	54
56667	56642.7	-25	1.145		24 *3H6 3F4		5
57476	57526.4	50	1.039		21 3H5 1D2		3
57805	57829.3	25	1.085		27 *3H6 3D3		1
58056	57961.5	-95	1.110		27 *3F4 3F3		5
58276	58236.5	-40	1.129		29 *3F4 3D2		2
58484	58500.7	17	1.024		35 *3F4 1D2		5
60205	60263.0	58	0.968		58 3H5 3D1		7
60350	60418.6	69	1.189		18 *3H6 1F3		1
60681	60658.7	-22	1.031		25 *3F4 3D2		1
60809	60832.4	24	1.098		41 *3H4 3F2		2
61130	61241.0	111	1.133		25 3H5 3F3		
61320	61306.2	-14	1.062		58 *3F4 3F4		2
61780	61703.5	-76	1.051		18 3H5 3F2		3
61880	61925.1	45	1.088		30 3H5 3F3		2
62800			1.053		41 3H5 3D2		1
63612	63708.7	97	1.160		29 *3H6 1P1		6
63941			1.118		20 3H5 3F4		3
64209			1.150		33 *3F4 3P2		6
64463			1.034		27 3H5 3D3		12
64689			1.128			99 *1G4 3P2	75
65215			1.049		42 *3H4 3F3		2
65576	65436.9	-139	1.088		29 *3H4 1D2		4
66131			1.090		17 *3H4 3D2		2
66200			1.083		33 *3F4 1F3		2
66735			1.111		27 *3H4 3D2		1
67479			1.117		18 3F3 3F3		12

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12 DP	F12 SP	PURETÉ F12 SP
67890			1.094		38 *3H4 3F4		2
MATRICE J=7							
39558	39638.4	80	1.195	1.185		95 *3H6 3P1	95
43698	43717.3	19	1.238	1.25		99 *3H6 3P2	95
47169	47299.7	131	1.140			95 *3H6 1P1	50
49719	49765.7	46	1.106	1.105	44 *3H6 3F2		11
51154	51176.9	23	1.163			98 3H5 3P2	91
52230	52331.3	101	1.088		60 *3H6 3D1		9
52571	52661.7	91	1.222	1.204	42 *3H6 3F3		1
53201	53304.9	104	1.097		30 *3H6 1D2		3
53809	53738.9	-70	1.163		70 *3H6 3D2		2
54997	54988.9	-8	1.134		36 *3H6 3D3		1
55704	55758.3	55	1.033	1.03	24 3H5 3F2		
56166	56157.3	-9	1.128		31 3H5 3F2		1
57479	57573.3	94	1.168		28 *3H6 3P1		2
57953	58051.3	98	1.198		40 *3H6 3F4		2
58990	58978.9	-12	1.107		51 *3F4 3F3		1
59861			1.040		34 3H5 1D2		1
60381	60325.7	-55	1.166		30 *3F4 3F4		
60519	60539.6	21	1.105		25 *3F4 3F4		1
61078	61133.4	55	1.145		33 *3H6 1F3		2
62080	62113.1	33	1.109		39 3H5 3D2		1
62427	62285.8	-141	1.128		28 *3H6 1F3		1
63293			1.118		42 *3H5 3D3		1
64094			1.031		77 *3H4 3F3		1
64497			1.117		26 *3H6 1P1		18
64937			1.145		39 3H5 3F4		2
66131			1.069		64 *3F4 1F3		5

E CALC.	E OBS.	ΔE	G CALC.	G OBS.	COMPOSITION EN JJ F12 DP	PURETE F12 SP
66785	66764.3	-21	1.147		48 3H5 3P1	2
67686			1.092		52 *3H4 3D3	

MATRICE J=8

42606	42570.9	-35	1.249	1.25		100 *3H6 3P2	94
47714	47654.4	-59	1.053	1.06	73 *3H6 3F2		
50992	51116.3	124	1.180	1.175	27 *3H6 102		3
52051	52003.5	-47	1.115	1.115	44 *3H6 3F3		
53739			1.153		47 *3H6 3D2		
54611	54636.3	26	1.176		43 *3H6 3D3		1
56343			1.209		37 *3H6 3F4		
58030			1.216		44 *3H6 3P2		2
58674			1.062		85 3H5 3F3		
60363	60396.7	33	1.122		71 *3H6 1F3		
62233			1.164		59 *3F4 3F4		
62552			1.123		59 3H5 3D3		
64764			1.135		69 3H5 3F4		
66380			1.068		63 3H5 1F3		
67464			1.103		85 *3H4 3F4		

MATRICE J=9

50047			1.137		91 *3H6 3F3		
53820			1.197		68 *3H6 3D3		
55650			1.192		76 *3H6 3F4		
57950			1.137		75 *3H6 1F3		
61777			1.132		98 3H5 3F4		

MATRICE J=10

52601			1.199		100 *3H6 3F4		
-------	--	--	-------	--	--------------	--	--

pu constater que les niveaux 45987 $J = 5$, 48195 $J = 6$ et 47299 $J = 7$, attribués par N. SPECTOR [48] au terme (${}^3H_6 {}^1P_1$) de $f^{12}sp$, sont respectivement 68, 68 et 50 % $f^{12}dp$. Le mélange des niveaux des termes 1P_1 des groupes d'électrons extérieurs, 6s6p et 5d6p, est en effet très grand. Finalement, les multiplets de $f^{12}sp$ construits à partir de $*{}^3H_6$, 3H_5 et $*{}^3F_4$ de f^{12} , sont complets.

$$3 - 4f^{13}7s$$

Les quatre niveaux de la configuration $f^{13}7s$ ont été identifiés. Les intensités des transitions des niveaux de $f^{13}6s$ et $f^{13}7s$ avec les niveaux pairs, dont le pourcentage d'appartenance à $f^{13}p$ est supérieur à 20 %, sont comparées dans le tableau 26.

De ces quatre niveaux, il est aisé d'extraire les valeurs de paramètres ζ_{4f} et $G_3(4f, 7s)$ à l'aide des relations suivantes :

$$\zeta_{4f} = \frac{2}{7} (E({}^3F_2) - E({}^3F_4)) = 2502 \text{ cm}^{-1}$$

$$G_3(4f, 7s) = \frac{1}{2} [E({}^1F_3) - E({}^3F_2) + E({}^3F_3) - E({}^3F_4)] = 85 \text{ cm}^{-1}.$$

L'identification de $f^{13}7s$ nous a permis de donner une valeur approchée du potentiel d'ionisation de Tm II fondée sur la position observée des deux niveaux 3F_4 et 3F_3 . La distance ΔT , entre le centre de gravité des niveaux 3F_4 et 3F_3 de $f^{13}6s$ et $f^{13}7s$, est 53596 cm^{-1} . Elle est en excellent accord avec la valeur de 53600 cm^{-1} déterminée graphiquement par J. SUGAR et J. READER [53]. La valeur du potentiel d'ionisation de 12,05 volt, approchée empiriquement par ces auteurs, reste inchangée. Cette énergie d'ionisation restera semi-empirique tant que l'hypothèse sur la variation du défaut quantique δn_a choisie égale à $1,050 \pm 0.005$ entre 6s et 7s, ne sera pas confirmée par l'identification des termes plus élevés de la série $f^{13}ns$.

TABLEAU 26 - Transitions de f^{13}_{6s} , f^{13}_{7s} avec les niveaux pairs -

Niveaux pairs	J	$4f^{13}_{6s}$				$4f^{13}_{7s}$			
		3F_4	3F_3	3F_2	1F_3	3F_4	3F_3	3F_2	1F_3
		0	236,9	8769,7	8957,5	53673,0	53733,5	62429,5	62538,2
25980	3	10000	3000	2	30	200			
26574	4	5000	6000			400	300		
26578	3	6000	1000	4	7	200	15		
26837	3	1500				3			
28875	5	5000				1000			
29183	4	2000	2000			200	500		
29285	2		3000	20			500		
29424	3	3000	15000		5	30	1000		
29967	2		9000	5	5		500		
31899	4	8000	5000		80	300	300		
31926	5	40000				1000			
36132	3	40	300	1000	1000	2	5	20	20
36394	2			1	2000				60
37916	1			1000				200	
39843	4	5000			5000				500
39893	3	30	200	1000	1000			80	100

4 - Liste des niveaux impairs

Les énergies, noms et facteurs de Landé g mesurés des niveaux impairs sont donnés dans la liste 4.

Les niveaux de $f^{12}sp$ sont groupés en multiplet en respectant les désignations du couplage $*J_1J_2$. Tous ces niveaux apparaissent dans le diagramme d'énergie de la figure 17.

Au total, sur les 197 niveaux connus, 193 ont reçu une interprétation; ils sont construits, en général pour $f^{12}dp$ et $f^{12}sp$, à partir des termes $*^3H_6$, $*^3F_4$ et 3H_5 de f^{12} .

CONCLUSION

Grâce à l'étude des spectrogrammes Zeeman, notre connaissances des spectres de Tm I et II a accompli de sensibles progrès, comme le montre les tableaux 27 et 28. Depuis 1964, où trois configurations seulement $f^{13}s^2$, $f^{13}sp$ et $f^{13}6s7s$ étaient localisées, huit configurations nouvelles de Tm I ont été trouvées et tous leurs niveaux profonds identifiés. Dans Tm II, quatre configurations nouvelles $f^{12}d^2$, $f^{13}d$, $f^{12}dp$ et $f^{13}7s$ viennent s'ajouter aux quatre configurations initialement connues. L'utilisation de la méthode empirique de G. RACAH pour calculer les énergies d'un atome, nous a permis de mieux comprendre la structure observée des niveaux.

Elle a facilité, notamment, l'identification des configurations et la recherche systématique des niveaux élevés. Les valeurs obtenues des intégrales de Slater et des constantes de couplage spin-orbite seront une aide précieuse pour l'étude et la classification des éléments voisins. Finalement, 60 % des raies de Tm I et 55 % des raies de Tm II ont été classées; elles représentent respectivement 90 et 80 % de l'énergie émise dans ces deux spectres.

LISTE 4 NIVEAUX IMPAIRES DE IM 11.

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F13 6S	3F	4	0.00	1.25
		3	236.95	1.035
		2	8769.68	0.667
.. ..	1F	3	8957.47	1.055
4F13(2F7/2) 5D	(7/2,3/2)	2	17624.65	1.48
		5	20228.75	1.020
		3	21713.74	1.22
		4	22457.51	
.. ..	(7/2,5/2)	6	21133.68	1.167
		2	21978.77	1.02
		1	22141.96	1.325
		4	23524.09	
		5	24273.20	1.18
4F12(*3H6) 6S6P(3P)	(6,0)	6	38225.46	1.273
.. ..	(6,1)	6	39477.60	1.12
		7	39638.41	1.185
		5	39863.81	1.189
.. ..	(6,2)	8	42570.92	1.25
		4	43217.64	1.07
		7	43717.30	1.25
		5	43840.82	1.10
		6	43998.81	1.20
4F12(*3F4) 6S6P(3P)	(4,0)	4	44237.17	1.265
.. ..	(4,1)	5	45191.25	1.21
		3	45338.74	1.05
		4	45648.93	1.07
4F12(3H5) 6S6P(3P)	(5,0)	5	46807.32	1.08
.. ..	(5,1)	5	47614.14	1.04
		6	47927.14	1.095
		4	48048.19	1.00
4F12(*3H6) 5D6P(3F)	(6,2)	4	44838.25	1.365
		5	45987.89	1.22
		8	47654.43	1.06
		6	48195.94	1.15
		7	49765.68	1.105
4F12(*3H6) 6S6P(1P)	(6,1)	7	47299.68	
		5	47808.54	1.25
		6	49195.03	1.19

CONFIGURATION	DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F12(*3F4) 6S6P(3P)	(4,2)	5	48807.26	1.185
		6	48898.13	1.27
		2	49140.88	
		4	49147.65	1.19
		3	49174.05	1.14
4F12(*3H6) 5D6P(1D)	(6,2)	4	49792.42	1.265
		6	50617.56	1.25
		5	51081.49	1.25
		8	51116.29	1.175
		7	53304.88	
4F12(*3H4) 6S6P(3P)	(4,0)	4	51227.72	
4F12(3H5) 6S6P(3P)	(5,2)	3	50926.27	0.87
		7	51176.90	
		4	51583.14	
		5	52026.52	
		6	52056.86	
4F12(*3H6) 5D6P(3D)	(6,1)	5	50274.65	1.29
		7	52331.33	
		6	52791.11	1.125
4F12(*3H6) 5D6P(3F)	(6,3)	3	49429.59	1.25
		4	50766.21	1.18
		8	52003.50	1.115
		7	52661.66	1.204
		5	52907.86	1.135
		6	53013.80	1.19
4F12(*3H4) 6S6P(3P)	(4,1)	4	52255.94	
		3	52361.95	
		5	52499.37	
4F12(3F3) 6S6P(3P)	(3,0)	3	53150.82	
4F12(*3F4) 6S6P(1P)	(4,1)	5	53336.89	
		3	53494.12	
		4	53576.66	
4F13 7S	3F	4	53673.03	1.24
		3	53733.50	1.03
4F12(*3H6) 5D6P(3D)	(6,2)	3	51885.80	
		4	53002.40	
		7	53738.88	
		5	54317.06	
		6	54710.56	
4F12(3F3) 6S6P(3P)	(3,1)	2	53888.54	
		4	53955.64	
		3	54354.01	
4F12(*3F2) 6S6P(3P)	(3,1)	3	54536.94	

CONFIGURATION		DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F12	5D6P		2	53411.92	1.03
			6	53896.44	
			4	54419.68	
			5	54523.58	
			4	54583.82	
			8	54636.26	
			3	54679.43	
			7	54988.96	
			3	55138.18	
			6	55157.61	
			5	55167.69	
			6	55476.18	
			7	55758.31	
4F12(3H5)	6S6P(1P)	(5,1)	6	55753.84	
			4	55833.29	
			5	57050.32	
4F12(*3H4)	6S6P(3P)	(4,2)	6	55972.37	
			3	56042.07	
			5	56066.86	
			4	56351.99	
4F12	5D6P		7	56157.29	
			3	56356.92	
			5	56506.46	
			6	56642.72	
			4	56714.21	
			5	56853.76	
			3	57253.02	
4F12(3F3)	6S6P(3P)	(3,2)	3	57465.55	
			4	57520.46	
			5	57599.35	
4F12	5D6P		6	57526.40	
			3	57547.98	
			7	57573.34	
			4	57741.72	
			6	57829.34	
			4	57859.31	
			3	57919.15	
			6	57961.53	
			7	58051.31	
			5	58107.79	
			6	58236.52	
4F12(*3F2)	6S6P(3P)	(2,2)	4	58351.88	
			3	58379.52	
4F12	5D6P		5	58383.36	
			6	58500.70	
			5	58538.86	
			3	58644.27	
			5	58698.22	

CONFIGURATION		UARY DESIGNATION	J. NIVEAU	G OBS.	
		11-401	(CM-1)		
4F12	5D6P	02-43556	5	3	58742.98
				7	58978.88
				4	59067.28
				2	59156.94
				4	59297.28
				5	59607.45
				4	59663.34
				3	59763.33
				3	59815.73
4F12(*1G4) 6S6P(3P)		(4,0)	4	59889.74	
4F12	5D6P			4	60004.92
				3	60116.36
				5	60255.39
				6	60262.99
				4	60278.73
				7	60325.70
				8	60396.70
				6	60418.58
				7	60539.57
				4	60539.76
				3	60572.87
				6	60658.68
				6	60832.41
				5	60911.20
				4	61114.46
				7	61133.45
4F12(*1G4) 6S6P(3P)		(4,1)	4	60745.41	
			5	61141.94	
			3	61300.92	
4F12	5D6P			4	61213.08
				6	61241.01
				2	61295.19
				6	61306.24
				5	61356.54
				4	61449.15
				3	61600.79
				5	61650.80
				6	61703.46
				5	61745.85
				4	61790.65
				5	61924.30
				6	61925.14
				4	62108.60
				7	62113.10
				7	62285.76
				5	62319.36
4F12	5D6P			4	62348.84
				3	62439.68

CONFIGURATION			DESIGNATION	J	NIVEAU (CM-1)	G OBS.
4F13	75	"	3F	2	62429.50	
"	"	"	1F	3	62538.25	
4F12	506P			5	62550.58	
				3	62739.54	
				4	62796.72	
				4	62854.85	
				3	63206.57	
				5	63533.13	
				5	63605.54	
				6	63708.71	
				3	64018.59	
				3	65031.02	
				6	65436.96	
				4	65512.56	
				3	65612.85	
				7	66764.29	
				3	56898.24	
				2	59135.89	
				3	60503.23	
				5	63787.29	



fig. 17

- Diagramme d'énergie des niveaux impairs de Tm II -

TABLEAU 27 - Etat actuel des connaissances de Tm I -

Configurations		Nombre total de niveaux observés		Etude paramétrique	Couplage	
Noms	Nbre total de niveaux	Avant 1964	Après	$\overline{\Delta E}$ (cm^{-1})	Nom	Pureté
PAIRES		<u>45</u>	<u>104</u>			
f^{13}_{sp}	24	10	24	} 105	$j_1 J_2$	75 %
$f^{12}_{ds^2}$	107		56		* $J_1 j_2$	70 %
f^{13}_{dp}	113		40		$j_1 J_2$	60 %
IMPAIRES		<u>10</u>	<u>281</u>			
f^{13}_s	2	2		} 79	$j_1 L_2$	81 %
f^{13}_{5d6s}	39		36		* $J_1 j_2$	93 %
$f^{12}_{s^2 p}$	69		28		$J_1 J_2$	47 % (pour $J \rightarrow 15/2$)
f^{12}_{dsp}	1229		162			
f^{13}_{6s7s}	8	3	8			
f^{13}_{6s6d}	39		20	23	$j_1 L_2$	70 %
f^{13}_{6s8s}	8		4			
f^{13}_p	30		11	76	$j_1 J_2$	74 %

TABLEAU 28 - Etat actuel des connaissances de Tm II -

Configurations		Nombre total de niveaux observés		Etude paramétrique	Couplage	
Noms	Nbre total de niveaux	Avant 1964	Après	$\overline{\Delta E}$ (cm^{-1})	Nom	Pureté
PAIRES		<u>66</u>	<u>158</u>			
$f^{12}_{s^2}$	13	3	5	105	SL	60 %
f^{12}_{ds}	214	20	102		* $J_1 L_2$	60 %
f^{13}_p	12	6	12		$\dot{J}_1 \dot{L}_2$	
$f^{12}_{d^2}$	457		36			
IMPAIRS		<u>30</u>	<u>197</u>			
f^{13}_{6s}	4	4		30	SL	55 %
f^{13}_d	20		9		$\dot{J}_1 \dot{J}_2$	85 %
f^{12}_{sp}	138	16	176	97	* $J_1 J_2$	87 %
f^{12}_{dp}	626				* $J_1 J_2$	41 % (pour $J \geq 5$)
f^{13}_{7s}	4		4			

DEUXIEME PARTIE

{ SPECTRES D'ABSORPTION DE L'YTTERBIUM , DU LUTECIUM ET DU THULIUM }

CHAPITRE I

GENERALITES SUR LES SPECTRES D'ABSORPTION ET LA METHODE EXPERIMENTALE

I - 1 - INTRODUCTION

L'étude des régularités observées dans les fréquences émises par les atomes, a été entreprise avant le début du siècle. Dès 1885, J.J.BALMER découvrit une relation connectant entre elles les longueurs d'onde visibles de l'hydrogène. Quelques années plus tard, J.R. RYDBERG généralisa cette relation au calcul des nombres d'ondes d'une série spectrale. L'introduction du modèle de N. BOHR et son application à l'atome d'hydrogène en 1913, ont été les premiers pas de la classification des spectres.

Dans ce modèle classique, l'énergie négative d'un électron sur une orbite circulaire, proportionnelle à n^2 , est quantifiée par la relation :

$$T_n = \frac{R}{n^2} = - \frac{E_n}{hc}$$

avec R la constante de RYDBERG égale à $109737,31 \text{ cm}^{-1}$
et n le nombre quantique principal.

Pour expliquer les séries observées dans les alcalins, assimilés à des atomes hydrogénoïdes possédant un coeur (noyau + (Z-1) électrons) de charge e, le nombre quantique n a été remplacé par un nombre quantique effectif n^* . La quantité μ_n égale à $n - n^*$ ou défaut quantique, mesure alors

les distorsions, entre le modèle atomique réel et le modèle de BOHR. Ce défaut quantique μ_n est faible pour les orbites électroniques de petite ellipticité, telles que d, f et g, dont le nombre quantique azimuthal l est élevé. En revanche, μ_n devient grand pour les électrons s et p qui pénètrent dans le coeur d'où il résulte que l'approximation du modèle sphérique noyau + électron n'est plus correcte. L'étude des défauts quantiques des électrons nl a été largement explicitée par B. EDLEN [54], dans l'analyse des structures atomiques simples.

De cette étude il faut retenir que dans l'hypothèse de la variation lente du défaut quantique quand n augmente (atome de plus en plus hydrogénoïde), il est possible d'extrapoler la limite T_∞ d'une série nl , avec une grande précision, limite qui correspond très souvent à l'énergie nécessaire pour ioniser un atome.

I - 2 - DETERMINATION DE LA LIMITE D'UNE SERIE

Pour extrapoler la limite T_∞ d'une série nl , nous utiliserons la méthode d'ajustement du défaut quantique développée par M. SEATON [55]. La quantité μ_n de chaque terme n est exprimée sous la forme d'un polynôme (formule de Ritz généralisée) en e_n , dont il faut rechercher les coefficients C_i tels que :

$$\mu_n = C_2 + C_3 e_n + \dots + C_N e_n^{N-2}$$

où e_n est l'énergie réduite du terme T_n égale à :

$$- \frac{(T_\infty - E_n)}{R Z^2}$$

avec T_∞ la limite de la série et Z le degré d'ionisation de l'atome.

Ces coefficients C_i sont optimisés par moindre carré entre les énergies observées E_n (obs) et les énergies calculées E_n (calc) des termes identifiés de la série. Les termes calculés E_n sont donnés en fonction des C_i par :

$$E_n(C_1, C_2, \dots, C_N) = T_{\infty}^{(0)} + R Z^2 (C_1 + e_n)$$

où $T_{\infty}^{(0)}$ est une valeur estimée, la plus proche possible de la limite cherchée et les E_n solutions de l'équation suivante :

$$e_n = \frac{-1}{[n - \mu_n(C_2, C_3, \dots, C_N; e_n)]^2}$$

L'introduction de la fonction,

$$S(C_1, C_2, \dots, C_N) = \sum_{n=n_1+1}^{n_1+n_2} \frac{E_n(\text{obs}) - E_n(C_1, C_2, \dots, C_N)}{R Z^2}$$

et la recherche par moindre carré des solutions $\frac{\partial S}{\partial C_i} = 0$ pour $i = 1, 2, \dots, N$, permettent d'ajuster, après plusieurs itérations, la variation du défaut quantique et de calculer la valeur T_{∞} .

L'erreur ΔT_{∞} , commise sur la détermination de la limite de la série, est donnée par :

$$\Delta T_{\infty} = \left[\frac{\sum_{n=n_1}^{n_1+n_2} [E_n(\text{obs}) - E_n(\text{calc})]^2}{n_2 - N} \right]^{\frac{1}{2}}$$

avec n_2 , le nombre de termes observés et N , le nombre de paramètres C_i utilisés ($N < n_2$).

L'incertitude ΔT_{∞} est liée au nombre de termes observés et, plus particulièrement, aux termes élevés (n grand), dont les défauts quantiques calculés restent très sensibles aux fluctuations de T_{∞} .

I - 3 - DISPOSITIF EXPERIMENTAL

Le montage que nous avons utilisé à Argonne, a été décrit par F.S. TOMKINS et B. ERCOLI [56]. Il est schématiquement représenté sur la figure 18.

La source blanche est la partie positive d'une décharge de 2A sous 2000 V dans un capillaire, aux parois internes platinisées, rempli en circulation continue d'hydrogène. Cette source, décrite par G. CLARKE et W.R.S. GARTON [57], délivre un spectre continu de lumière blanche entre 1650 et 2600 Å. Le four à induction est représenté en coupe sur la figure 19. La chambre d'absorption est constituée d'un tube en tantale ($e : 1/10$ mm, $\phi : 42$ mm et $L : 120$ mm), chauffé par induction à l'aide d'un générateur d'une puissance de 10 kW à la fréquence de 450 kc. La température de fonctionnement peut atteindre 2200°C. Un système d'enceintes, fendues suivant leur longueur pour éviter la circulation des courants induits, joue le rôle d'écrans thermiques. La consommation de matière est faible; quelques milligrammes, sous forme métallique, du corps à étudier assurent une heure de fonctionnement, environ. L'enceinte est emplie d'hélium, à la pression de 2 mm de Hg, pour ralentir la diffusion de la vapeur vers les parties froides.

Des courbes de pression de vapeur en fonction de la température [58] [59], permettent de définir pour chaque élément, les conditions optimums pour obtenir une pression comprise entre 2 et 4 mm de Hg. La température du tube en tantale est mesurée à l'aide d'un pyromètre optique.

Dans le domaine 1650 - 2400 Å, nous avons utilisé un spectrographe sous vide Mc Pherson de 3 mètres de focale. La dispersion moyenne est de 2,7 Å/mm. Avec une fente de 30 μ , les temps de pose varient entre 5 et 10

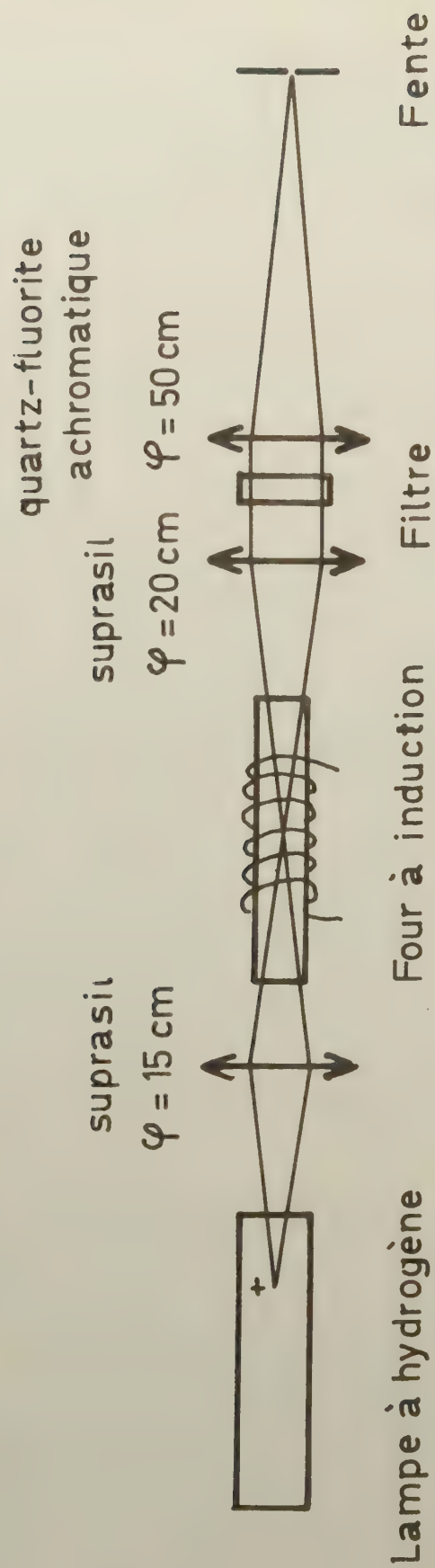


fig. 18

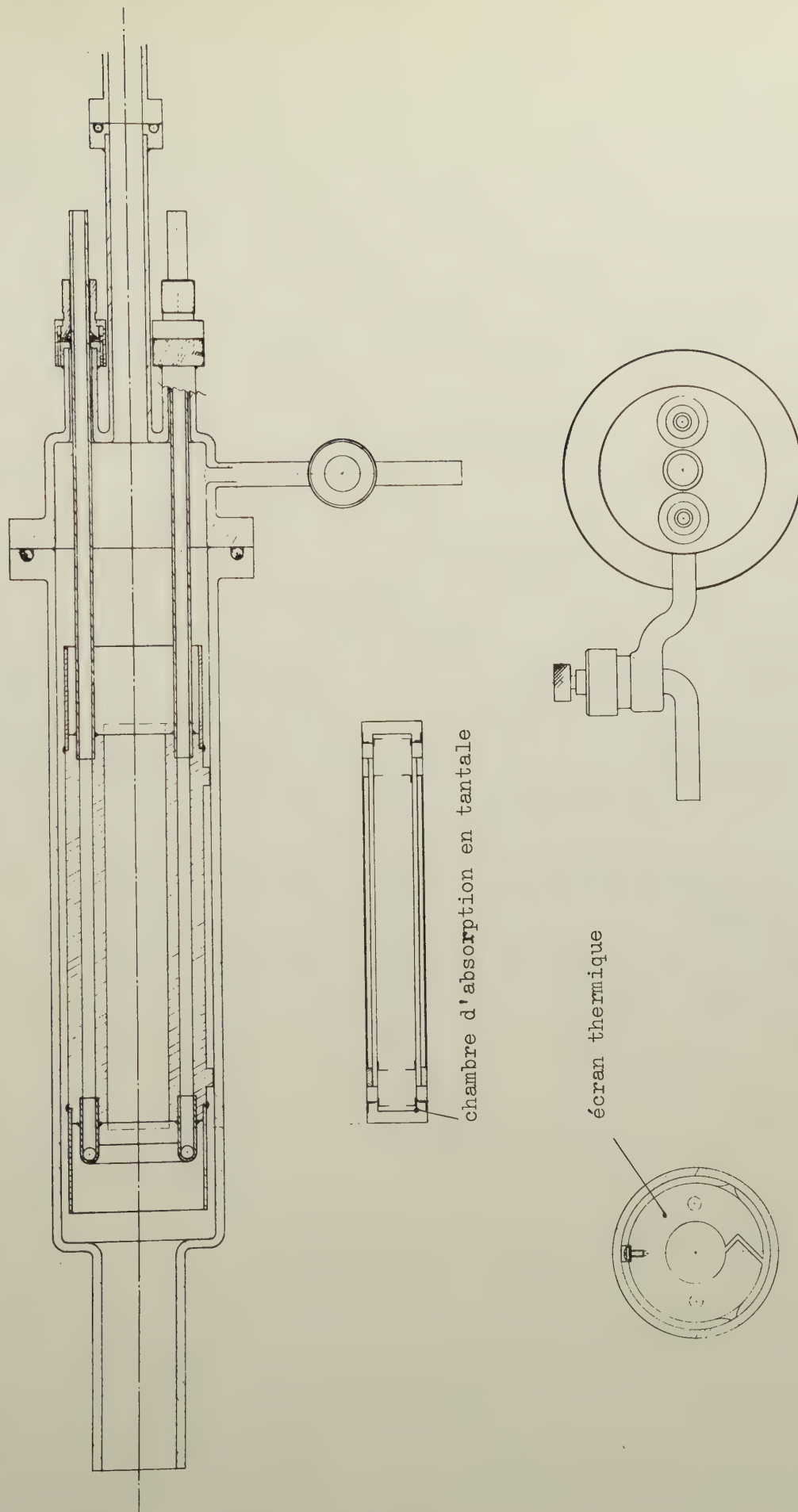


fig. 19

- Four à induction -

secondes. Les longueurs d'onde du cuivre [60] [61] et du germanium [61] [62] [63] émises par une cathode creuse refroidie à eau, fournissent l'étalonnage des plaques photographiques. La position des raies a été pointée avec le comparateur semi-automatique d'Argonne et l'incertitude moyenne des mesures, pour les raies fines, est de $0,004 \text{ \AA}$.

Entre $2200 \text{ \AA}$ et $2750 \text{ \AA}$, nous avons utilisé le grand spectrographe Paschen-Runge dans le troisième ordre du réseau G5 (1200 t/mm.) et obtenu une dispersion de $0,3 \text{ \AA/mm}$. Les temps de pose varient entre 15 et 20 minutes pour une fente de $30 \text{ }\mu$.

Les longueurs d'onde du thorium, mesurées par A. GIACHETTI [64] et observées dans le deuxième ordre de G5 ont servi de référence. En raison de la durée très courte de notre séjour à Argonne, les plaques photographiques de Tm, de plus grande dispersion, n'ont pu être mesurées avec le comparateur semi-automatique. L'incertitude moyenne des mesures effectuées, depuis, avec la loupe micrométrique est de $0,008 \text{ \AA}$.

Une indication sur l'intensité et la forme des raies sera donnée dans les listes de longueurs d'onde, à l'aide de la notation suivante :
 raies extrêmement forte (6), très forte (5), forte (4), moyenne (3), faible (2), très faible (1), large (L) et diffuse (D).

CHAPITRE II

SPECTRES D'ABSORPTION OBSERVES ET INTERPRETES

II - 1 - SPECTRE DE L'YTTERBIUMExpérience

La liste 5 rassemble 63 raies observées entre 2300 et 1980 Å. La température du four était de 900°C.

Interprétation

Tous les niveaux impairs, de nombre quantique J égal à 1, trouvés par W.F. MEGGERS, sont confirmés par des transitions directes avec le niveau fondamental $6s^2 \ ^1S_0$ de Yb I ; exception faite du niveau 45956 $J = 1$, dont nous pensons que le J est égal à 2.

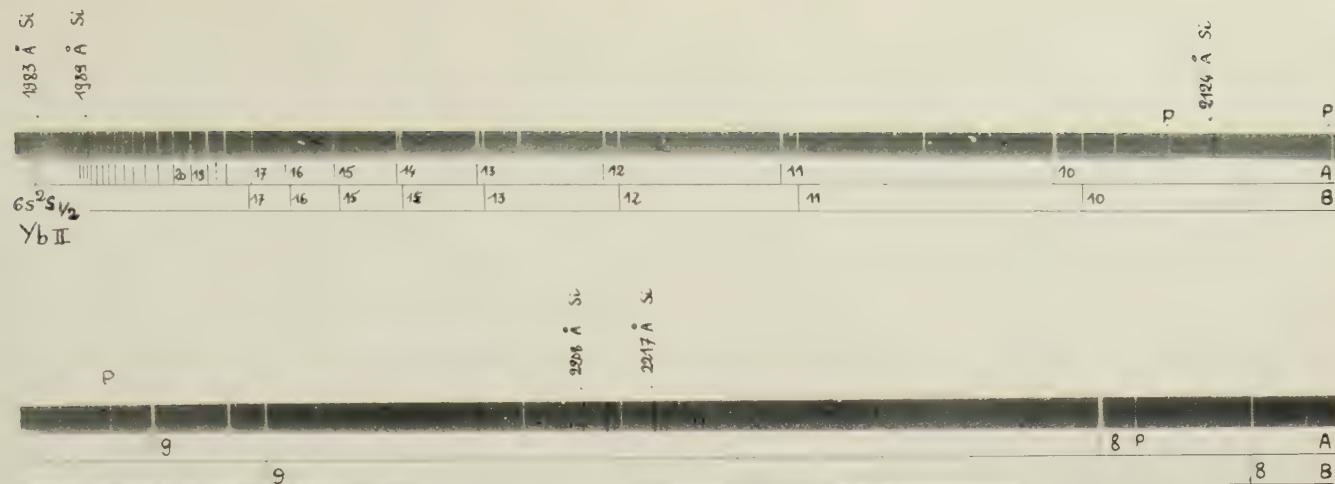
Les transitions observées appartiennent à la série principale $6s^2 - (6snp) \ ^1P_1, \ ^3P_1$. La photographie 1 reproduit le spectre entre 1950 Å et 2300 Å. Les termes 1P_1 de la série $6s^2 - 6snp$, désignée par la lettre A, sont repérés de $n = 8$ à $n = 38$ et mesurés sur la plaque photographique jusqu'à $n = 48$.

La série $6s^2 - 6snp \ ^3P_1$, notée B, est d'intensité plus faible en raison de la règle de sélection $\Delta S = 0$ qui interdit, en couplage LS pur, les transitions $^1S_0 - ^3P_1$. Des niveaux, 1P_1 et 3P_1 , appartenant à d'autres configurations perturbent ces séries. La variation, régulière ou irrégulière, des intensités des raies des séries A et B, donne une appréciation qualitative de la nature de ces perturbations. Entre 9B et 9A, le niveau perturba-

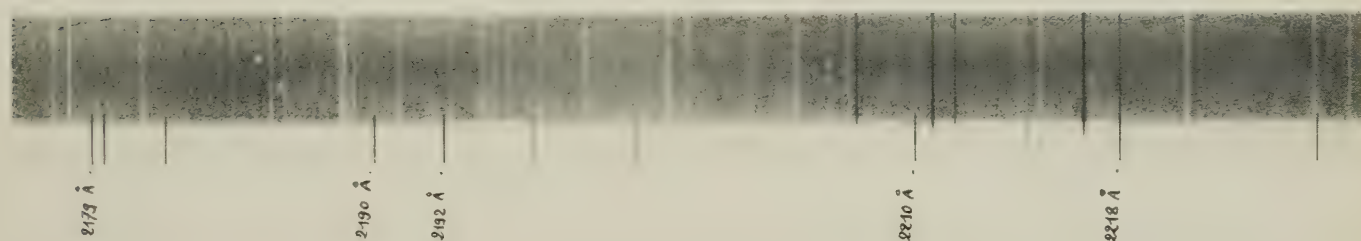
LISTE 5 SPECTRE D'ABSORPTION DE L'YTTERBIUM.

LONG. ONDE VIDE (A)	1	NOMB. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION			
2290.458	3	43659.39	0	0	-43659*	1
2271.819	6	44017.59	0	0	-44017*	1
2213.286	2	45181.69	0	0	-45181*	1
2170.189	3	46078.93	0	0	-46078*	1
2165.712	4	46174.19	0	0	-46174*	1
2156.554	5	46370.27	0	0	-46370*	1
2112.723	3	47332.28	0	0	-47332*	1
2108.764	3	47421.14	0	0	-47421*	1
2105.315	5	47498.83	0	0	-47498*	1
2089.454	4	47859.39	0	0	-47859*	1
2074.166	3	48212.15	0	0	-48212*	1
2072.176	5	48258.45	0	0	-48258*	1
2052.580	3	48719.17	0	0	-48719*	1
2050.785	4	48761.82	0	0	-48761*	1
2040.571	5	49005.89	0	0	-49005*	1
2036.242	4	49110.08	0	0	-49110*	1
2035.524	5	49127.40	0	0	-49127*	1
2026.241	3	49352.47	0	0	-49352*	1
2025.907	4	49360.61	0	0	-49360*	1
2018.716	2	49356.44	0	0	-49356*	1
2018.304	4	49456.55	0	0	-49546*	1
2012.980	2	49677.59	0	0	-49677*	1
2012.536	3	49688.55	0	0	-49688*	1
2008.581	3	49786.39	0	0	-49786*	1
2008.064	2	49799.21	0	0	-49799*	1
2005.329	4	49867.13	0	0	-49867*	1
2003.205	5	49920.00	0	0	-49920*	1
2001.237	4	49969.09	0	0	-49969*	1
1999.357	1	50016.08	0	0	-50016*	1
1999.151	3	50021.23	0	0	-50021*	1
1997.441	1	50064.06	0	0	-50064*	1
1997.298	3	50067.64	0	0	-50067*	1
1995.829	1	50104.49	0	0	-50104*	1
1995.709	3	50107.50	0	0	-50107*	1
1994.462	1	50138.83	0	0	-50138*	1
1994.355	3	50141.52	0	0	-50141*	1
1993.293	1	50168.24	0	0	-50168*	1
1993.199	3	50170.60	0	0	-50170*	1
1992.290	1	50193.50	0	0	-50193*	1
1992.200	3	50195.76	0	0	-50195*	1

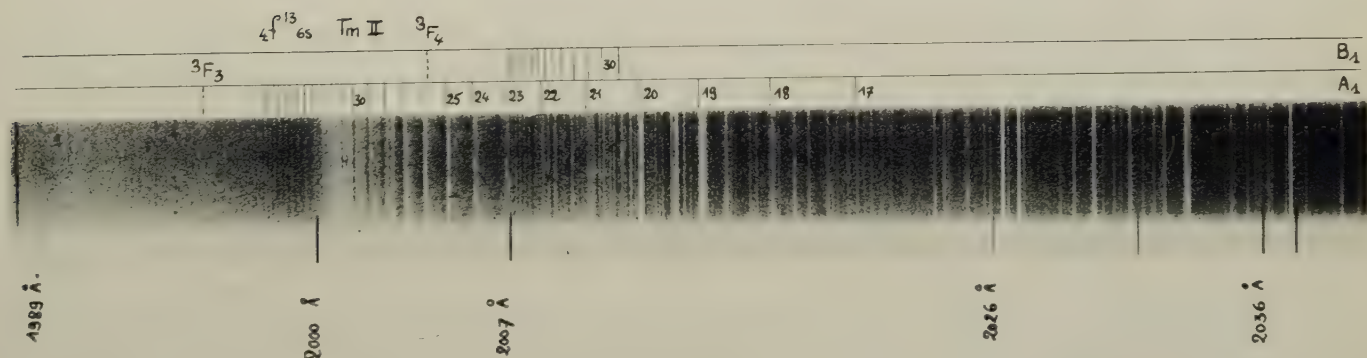
LONG. ONDE VIDE (A)	I	NOMB. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION			
1991.338	2	50217.49	0	0	-50217*	1
1990.584	2	50236.51	0	0	-50236*	1
1989.922	2	50253.23	0	0	-50253*	1
1989.335	2	50268.05	0	0	-50268*	1
1988.829	2	50280.84	0	0	-50280*	1
1988.370	10	50292.45	0	0	-50292*	1
1987.953	2	50303.00	0	0	-50303*	1
1987.590	10	50312.19	0	0	-50312*	1
1987.264	10	50320.44	0	0	-50320*	1
1986.955	2	50328.27	0	0	-50328*	1
1986.683	2	50335.16	0	0	-50335*	1
1986.438	1	50341.36	0	0	-50341*	1
1986.210	1	50347.14	0	0	-50347*	1
1986.002	1	50352.42	0	0	-50355*	1
1985.813	1	50357.21	0	0	-50357*	1
1985.634	1	50361.75	0	0	-50361*	1
1985.473	1	50365.83	0	0	-50365*	1
1985.324	1	50369.61	0	0	-50369*	1
1985.183	1	50373.19	0	0	-50373*	1
1985.056	1	50376.41	0	0	-50376*	1
1984.938	1	50379.41	0	0	-50379*	1
1984.828	1	50382.20	0	0	-50382*	1
1984.723	1	50384.86	0	0	-50384*	1



Photographie 1. Séries de Rydberg $6s^2 \ ^1S_0 - 6snp \ ^{1,3}P_1$ dans Yb I



Photographie 3. Spectre d'absorption du thulium entre 2230 Å et 2179 Å



Photographie 4. Séries de Rydberg $f^{13} ({}^2F_{7/2}) 6s^2 - f^{13} ({}^2F_{7/2}) 6snp$ de Tm I

teur 46174 $J = 1$ est probablement 3P_1 car l'intensité de 9B est plus forte que celle de 8B et 10B. De même, les transitions des termes 12B, 13B et 14B accusent un maximum d'intensité sous l'effet de la perturbation du niveau 49005 $J = 1$.

Le niveau 49920 $J = 1$ est probablement 1P_1 car il interagit fortement avec tous les termes élevés de la série A. Afin d'identifier avec plus de précision ces niveaux perturbateurs, nous avons calculé empiriquement les énergies des configurations $4f^{14} 6s (6p + 7p + 8p + 9p) + 4f^{13} (5d6s + 5d^2)6s + 4f^{14} 5d6p$ de Yb I, à partir du jeu de paramètres de la table 11. Les énergies des niveaux $J = 1$ et les composantes de leur vecteur propre sont données dans le tableau 29.

Tous les niveaux identifiés, étrangers à la série $6s^2 - 6snp$ appartiennent, soit à $f^{14}dp$, soit à $f^{13}d^2s$. La composition en 3P_1 et 1P_1 des vecteurs propres calculés est en accord avec les intensités observées des termes perturbés. Les raies faibles, marquées P (parasites) sur la reproduction photographique, ont aussi été observées dans les spectres de Tm et Lu, et éliminées de la liste définitive des longueurs d'onde. L'une d'elles, la raie 2139,246 Å, est la transition de résonance $3d^{10}4s^2\ ^1S_0 - 3d^{10}4s4p\ ^1P_1$ de Zn I.

Pour les termes n supérieurs à 25, la différence d'énergie entre les niveaux 1P_1 et 3P_1 , d'une même configuration $6snp$, tend vers une valeur très faible. Cette différence d'énergie égale à :

$$2 \left[(G_1 (6snp) + \frac{1}{4} \zeta_{np})^2 + \frac{1}{2} \zeta_{np}^2 \right]^{\frac{1}{2}}$$
 dépend linéairement des paramètres $G_1 (6snp)$ électrostatiques et ζ_{np} spin-orbite, et converge avec eux vers la valeur zéro quand n croît. En conséquence, les deux séries A et B aboutissent à la même limite, le niveau fondamental $^2S_{\frac{1}{2}}$ de Yb II.

TABLE 11

Paramètres de $f^{14}s(6p+7p+8p+9p) + f^{13}(ds+d^2)s + f^{14}dp$ de Yb I

Paramètres			Valeurs (cm^{-1})	Paramètres			Valeurs (cm^{-1})
T (6s6p)	1		23 242				
D (6s6p - 6s7p)	2		15 528	F_2 (dp)			149
D (6s6p - 6s8p)	3		20 615	G_1 (dp)			285
D (6s6p - 6s9p)	4		22 956	G_3 (dp)			7
D (6s6p - 5d6p)	5		25 300	R^1 (fp, ds) (1 x 6)	-	3 005	
D (6s6p - $f^{13}ds^2$)	6		8 547	R^3 (fp, sd) (1 x 6)	-	864	
D (6s6p - $f^{13}d^2s$)	7		29 614	R^1 (fp, ds) (2 x 6)	-	1 346	
B			346	R^3 (fp, sd) (2 x 6)	-	423	
C			1 107	R^1 (fp, ds) (5 x 7)	-	250	
G_1 (6s6p)			3 834	R^3 (fp, sd) (5 x 7)	-	35	
G_1 (6s7p)			870	R^1 (6s6p, 7p6s)			3 000
G_1 (6s8p)			200	ζ_f	6		2 673
G_1 (6s9p)			70	ζ_f	7		2 700
G_2 (ds)			1 350	ζ_d	6		850
G_3 (fs)			150	ζ_d	7		850
F_2 (fd)	6		136	ζ_d	5		691
F_4 (fd)			13	ζ_p	1		1 630
G_1 (fd)			119	ζ_p	5		1 757
G_3 (fd)			17	ζ_{7p}			600
G_5 (fd)		2,8		ζ_{8p}			171
F_2 (fd)	7		132	ζ_{9p}			50
F_4 (fd)			11				
G_1 (fd)			110				
G_3 (fd)			15				
G_5 (fd)			2				

TABLEAU 29 - Niveaux $J = 1$ de $f^{14}s$ (6p+7p+8p+9p) + $f^{13}(ds+ds^2)s$ + $f^{14}dp$
de Yb I

E. CALC.	E. OBS.	G. CALC.	G. OBS.	COMPOSITION		
17964	17992	1,489	1,49	96	$^3P_1(6s6p) +$	$^3P_1(6s7p) + 2\ ^1P_1(6s6p)$
25048	25068	1,037	1,035	71	$^3P_1(6s6p) + 14\ ^1P_1(f^{13}ds^2) +$	$7\ ^3P_1(f^{13}ds^2)$
28773	28857	1,279	1,26	66	$^3P_1(f^{13}ds^2) + 15\ ^1P_1(6s6p) +$	$11\ ^3D_1(f^{13}ds^2)$
37047	37414	0,785	1,02	66	$^3D_1(f^{13}ds^2) + 3\ ^3P_1(f^{13}ds^2) +$	$9\ ^1P_1(f^{13}ds^2)$
37950	38174	1,429	1,14	87	$^3P_1(6s7p) + 4\ ^1P_1(6s7p) +$	$3\ ^3D_1(f^{13}ds^2)$
38541	38422	0,967	1,07	60	$^1P_1(f^{13}ds^2) + 18\ ^3D_1(f^{13}ds^2) +$	$8\ ^3P_1(6s7p)$
40593	40563	1,013	1,01	87	$^1P_1(6s7p) + 7\ ^1P_1(f^{13}ds^2)$	
41488		1,53		38	$^5D_1(f^{13}ds^2) + 21\ ^5P_1$	$+ 13\ ^3P_1$
43474		1,29		26	$^5P_1 + 21\ ^3D_1$	$+ 21\ ^3S_1$
43543	43659	1,474	1,48	95	$^3P_1(6s8p) + 5\ ^1P_1(6s8p)$	
44085	44017	1,026	1,00	95	$^1P_1(6s8p) + 5\ ^3P_1(6s8p)$	
45269	45956	0,84	0,72	57	$^3D_1(5d6p) + 13\ ^1P_1(5d6p)$	
45373	45181	1,24	1,28	25	$^3P_1 + 18\ ^3S_1$	$+ 15\ ^3D_1(5d6p)$
45892	46174	1,338	1,22	43	$^3P_1 + 25\ ^3S_1$	$+ 9\ ^3D_1$
46095	46078	1,480	1,33	96	$^3P_1(6s9p) + 4\ ^1P_1(6s9p)$	
46275	46370	1,020	1,07	96	$^1P_1(6s9p) + 4\ ^3P_1(6s9p)$	
47595	47332	0,891	0,95	30	$^1P_1 + 22\ ^3D_1$	$+ 20\ ^1P_1$
47735	47859	1,335	1,28	42	$^3P_1 + 18\ ^3P_1(dp)$	$+ 12\ ^1P_1$
47936	49000	1,183		53	$^3P_1(dp) + 15\ ^3D_1(dp)$	$+ 15\ ^3P_1$
49662	49920	0,910		25	$^1P_1 + 16\ ^3D_1$	$+ 14\ ^3P_1$

Pour extrapoler la valeur T_{∞} et déterminer l'énergie d'ionisation de l'atome neutre avec la meilleure précision, nous avons éliminé de l'ajustement du défaut quantique les termes perturbés; ceux dont le mélange avec les niveaux $1,3P_1$ des configurations $f^{13}ds^2$, $f^{13}ds^2$, $f^{13}d^2s$ et $f^{13}dp$ est grand. Le tableau 30 rassemble les valeurs obtenues T_{∞} pour les séries A et B avec plusieurs jeux de termes utilisés. Les coefficients C_i sont ceux du développement du défaut quantique μ_n , défini précédemment. En première approximation, au second ordre de la théorie des perturbations, nous utiliserons la formule de correction $\frac{\alpha}{T_n - T_0}$ de Shenstone-Russell [65].

$T_n - T_0$ est la différence entre les énergies absolues des niveaux perturbés T_n et du niveau perturbateur T_0 .

Entre le niveau 49920 $J = 1$ et les termes élevés de la série A, α a été déterminé graphiquement et choisi égal à 4 cm^{-1} . Les limites T_{∞} , obtenues avec cette correction, sont données dans le tableau pour les mêmes jeux de termes. Les coefficients C_i des séries corrigées sont plus petits et la courbe de variation de $\mu_n(t)$ se rapproche d'une droite. Pour les termes $n > 24$, les effets de la perturbation étant faibles, les C_i restent sensiblement les mêmes.

La sortie du programme d'ajustement du défaut quantique pour les termes de la série A (24 à 48) est reproduite dans le tableau 31.

Nous adopterons pour limite de la série $6s^2 - 6snp \ ^1P_1$, la valeur de :

$$50441,0 \pm 0,2 \text{ cm}^{-1}.$$

La figure 20 donne la variation du défaut quantique μ_n pour les termes $n > 17$ avec T_{∞} égal à 50441 cm^{-1} . Entre les termes 18 et 19, la courbe ressemble à celle de la dispersion anormale [52] et est caractéristique de la perturbation provoquée par le niveau $49920 \text{ cm}^{-1} \ J = 1$.

TABLEAU 30

LIMITES DES SÉRIES A ET B

SÉRIE	# DES TERMES UTILISÉS	T_x (cm ⁻¹)	T_∞ CORRIGÉ (cm ⁻¹)	ΔT_∞ (cm ⁻¹)	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6
A	—	—	—	—	—	—	—	—	—
	6-48	50 434,6	—	26,2	3,6708	—11,751	—185,09	— 600,85	pas de conver- gence
	6-48	—	50 434,4	25,9	3,6645	—11,94	—186,93	— 605,86	pas de conver- gence
	6, 8, 10-16, 21-48	50 441,24	—	2,85	3,8606	— 7,2186	—328,49	—4 297,4	—13 005
	6, 8, 10-16, 21-48	—	50 441,9	2,85	3,9236	1,3035	5,575	pas de conver- gence	—
	6, 8, 10-12, 14-16, 21-48	50 441,90	—	1,21	3,9343	1,5205	6,3163	pas de conver- gence	—
B	6, 8, 10-12, 14-16, 21-48	—	50 441,88	1,00	3,9298	1,4404	6,0510	pas de conver- gence	—
	21-48	50 441,12	—	0,07	3,8651	92,586	61 771	1,0325 × 10 ⁷	pas de conver- gence
	21-48	—	50 441,11	0,07	3,8624	74,876	53 376	8,635 × 10 ⁶	pas de conver- gence
	24-40	50 440,90	—	0,08	3,7430	-- 43,469	pas de conver- gence	—	—
	24-40	—	50 440,83	0,08	3,7447	-- 48,796	pas de conver- gence	—	—
	6, 8-17, 20-25	50 442,31	—	7,9	3,9932	0,4577	3,4672	pas de conver- gence	—

Limite adoptée : 50 441,0 ± 0,2 cm⁻¹

- TABLEAU 31 -

AJUSTEMENT DU DEF AUT QUANTIQUE

YTTERBIUM SERIE A										
LIMITÉ 50440.979	RMSDT .071	C(1) -.18944-06	C(2) .37658+01	C(3) -.35751+02	C(4)	C(5)	C(6)	DN*(C=0)		
DELTA T	T(OBS)	T(CALC)	TABS(OBS)	TABS(CALC)	EPS(CALC)	DQ(CALC)	DQ(OBS)	N*(OBS)		
24	.00202	50170.600	50170.602	270.379	270.377	-.00246	3.85388	3.85396	20.14604	.00009
25	.00009	50195.760	50195.760	245.220	245.220	-.00223	3.84568	3.84569	21.15431	.00002
26	.05021	50217.490	50217.540	223.489	223.439	-.00204	3.83860	3.84110	22.15890	.00250
27	.01764	50236.510	50236.527	204.470	204.452	-.00186	3.83240	3.83342	23.16658	.00102
28	-.03874	50253.220	50253.182	187.759	187.798	-.00171	3.82696	3.82448	24.17552	-.00248
29	-.17769	50268.050	50267.873	172.930	173.107	-.00158	3.82213	3.80922	25.19078	-.01291
30	.05608	50280.840	50280.896	160.140	160.084	-.00146	3.81796	3.82257	26.17743	.00461
31	.04900	50292.450	50292.499	148.529	148.480	-.00135	3.81418	3.81869	27.18131	.00451
32	-.11822	50303.000	50302.882	137.979	138.098	-.00126	3.81074	3.79870	28.20130	-.001205
33	.01838	50312.190	50312.208	128.790	128.771	-.00117	3.80775	3.80986	29.19014	.00211
34	.17861	50320.440	50320.618	120.540	120.361	-.00110	3.80506	3.82747	30.17253	.02241
35	-.04004	50328.270	50328.230	112.709	112.749	-.00103	3.80251	3.79701	31.20299	-.00550
36	-.01034	50335.150	50335.140	105.830	105.840	-.00096	3.80027	3.79874	32.20126	-.00153
37	.07174	50341.360	50341.431	99.620	99.548	-.00091	3.79824	3.81025	33.18975	.01200
38	.02815	50347.150	50347.178	93.830	93.802	-.00085	3.79636	3.80154	34.19846	.00518
39	.02013	50352.420	50352.440	88.560	88.540	-.00081	3.79464	3.79870	35.20130	.00406
40	.06071	50357.210	50357.271	83.770	83.709	-.00076	3.79308	3.80626	36.19374	.01318
41	-.02412	50361.740	50361.716	79.239	79.263	-.00072	3.79160	3.78601	37.21399	-.00560
42	-.01403	50365.830	50365.816	75.149	75.163	-.00068	3.79027	3.78678	38.21322	-.00349
43	-.01456	50369.620	50369.606	71.359	71.374	-.00065	3.78904	3.78511	39.21489	-.00392
44	-.08488	50373.200	50373.116	67.779	67.864	-.00062	3.78787	3.76278	40.23722	-.02509
45	-.03812	50376.410	50376.372	64.569	64.607	-.00059	3.78683	3.77475	41.22525	-.01208
46	-.00029	50379.400	50379.400	61.580	61.580	-.00056	3.78585	3.78585	42.21415	-.00000
47	.01890	50382.200	50382.219	58.779	58.761	-.00054	3.78494	3.79179	43.20801	.00705
48	-.01070	50384.860	50384.850	56.120	56.130	-.00051	3.78407	3.77977	44.22003	-.00401

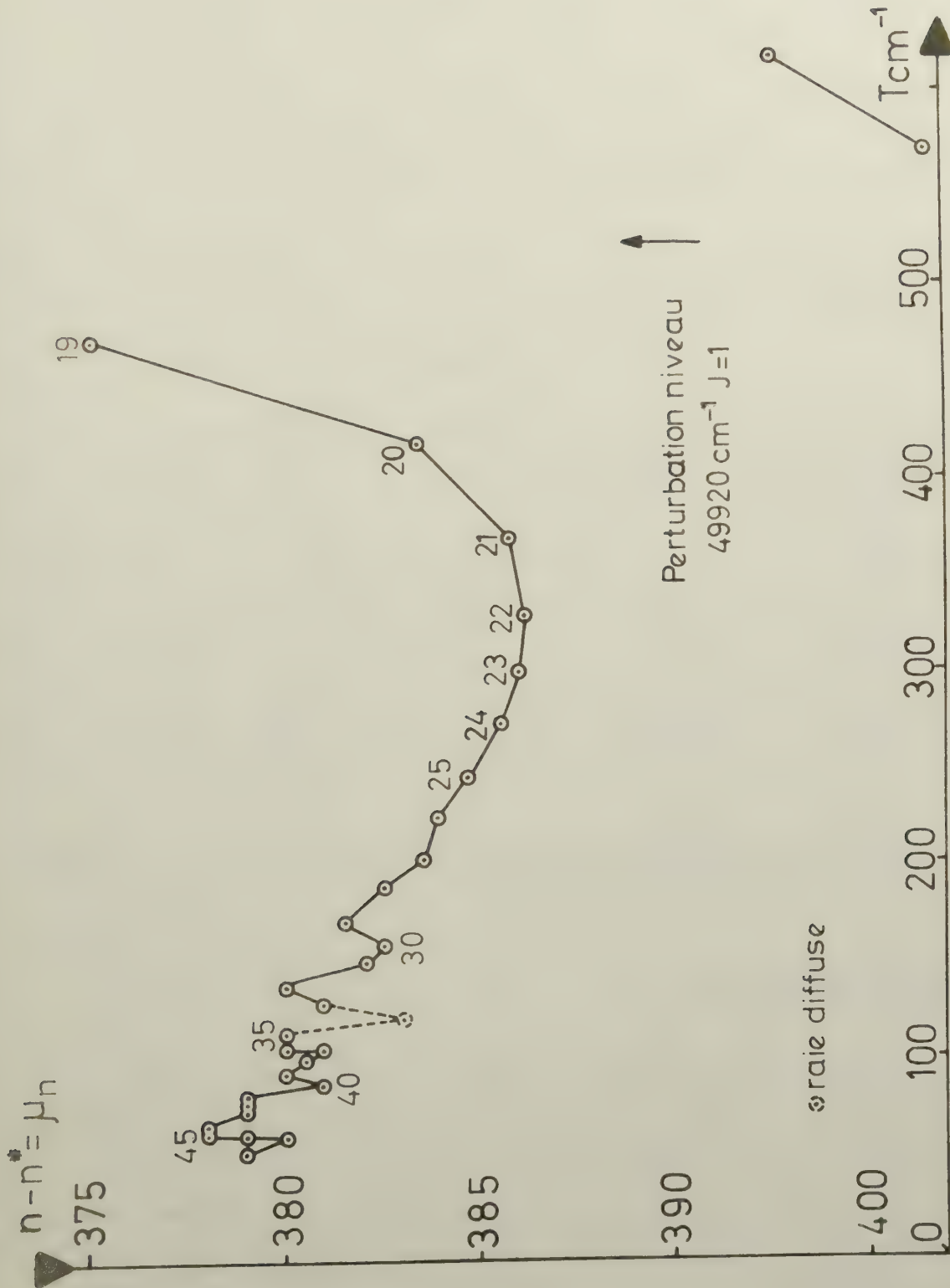


fig. 20

- Variation du défaut quantique μ_n pour la série $6s^2 \ ^1S_0 - 6snp \ ^1P_1$ de Yb I -

L'irrégularité des points pour $n > 33$ est due aux incertitudes des mesures, les raies devenant larges et diffuses au fur et à mesure que n augmente. Les tables 12 et 13 donnent les longueurs d'onde des transitions $6s^2 \ ^1S_0 - 6snp \ ^1,3P_1$ observées. Les nombres quantiques effectifs sont calculés en tenant compte de la limite 50441 cm^{-1} trouvée.

Utilisant, alors, le facteur de conversion [66] $8065,73 \pm 0,23 \text{ cm}^{-1}/\text{eV}$ nous déduisons de cette valeur le potentiel d'ionisation de Yb I soit :

$$6,2537 \pm 0,0002 \text{ Volt.}$$

Il est intéressant de comparer notre valeur à celles obtenues avant par spectroscopie et ionisation de surface :

Références	Ionisation de surface			Spestros- copie
	[67]	[68]	[69]	[70]
Potentiel d'ionisation (Volt)	$6,69 \pm 0,08$	$5,90 \pm 0,10$	$6,04 \pm 0,04$	6,22

Ces résultats ont déjà été publiés en collaboration avec F.S. TOMKINS [71].

II - 2 - SPECTRE DU LUTECIUM

Le spectre d'absorption de Lu I a déjà été observé en 1954 par L.F.H. BOVEY et W.R.S. GARTON [72], mais dans un domaine de longueurs d'onde trop restreint pour mettre en évidence les séries de Rydberg $n46s^2$. Devant les possibilités thermiques nouvelles du four à induction de F.S. TOMKINS, nous avons entrepris d'observer en absorption les séries de Rydberg $n46s^2$ de cet élément assez réfractaire.

TABLE 12

Yb I - Série principale $6s^2 1S_0 - 6s np^1 P_1^o -$

Limite : $50441,0 \text{ cm}^{-1}$

(A)	n	E_n (obs) (cm^{-1})	n *
3987,99	6	25068,23	2,0797
2464,50	7	40563,97	3,3332
λ_c			
2271,819	8	44017,59	4,1333
2156,554	9	46370,29	5,1921
2105,315	10	47498,83	6,1072
2072,176	11	48258,45	7,0908
2050,785	12	48761,81	8,0840
2035,524	13	49127,40	9,140
2025,907	14	49360,60	10,078
2018,304	15	49546,55	11,076
2012,536	16	49688,55	12,076
2008,064	17	49799,20	13,076
-	18	perturbé	-
2001,237	19	49969,10	15,249
1999,357	20	50021,23	16,168
1997,298	21	50067,64	17,144
1995,709	22	50107,50	18,140
1994,355	23	50141,52	19,142
1993,199	24	50170,60	20,145
1992,200	25	50195,76	21,153
1991,338	26	50217,49	22,158
1990,584	27	50236,51	23,165
1989,922	28	50253,22	24,175
1989,335	29	50268,05	25,185

1988,829	30	50280,84	26,175
1988,370	31	50292,45	27,18
1987,953	32	50303,00	28,20
1987,590	33	50312,19	29,19
1987,264	34	50320,44	30,17
1986,955	35	50328,27	31,20
1986,683	36	50335,15	32,20
1986,438	37	50341,36	33,19
1986,210	38	50347,15	34,195
1986,002	39	50352,42	35,20
1985,813	40	50357,21	36,19
1985,634	41	50361,74	37,21
1985,473	42	50365,83	38,21
1985,324	43	50369,62	39,21
1985,183	44	50373,20	40,22
1985,056	45	50376,41	41,22
1984,938	46	50379,40	42,21
1984,828	47	50382,20	43,20
1984,723	48	50384,86	44,21

TABLE 13
Yb I - série $6s^2 \ ^1S_0 - 6s np \ ^3P_1^o$ - Limite : $50441,0 \text{ cm}^{-1}$ -

λ (Å)	n	$E_n(\text{obs})(\text{cm}^{-1})$	n*	λ (Å)	n	$E_n(\text{obs})(\text{cm}^{-1})$	n*
5556,466	6	17992,01	1,839	2012,536	16	49677,59	11,99
...	7	perturbé	-	2008,581	17	49786,39	12,95
2290,458	8	43659,39	4,023	-	18	-	-
2170,189	9	46078,93	5,016	-	19	-	-
2108,764	10	47421,15	6,028	1999,357	20	50016,08	16,07
2074,166	11	48212,15	7,017	1997,441	21	50064,05	17,06
2052,580	12	48719,17	7,983	1995,829	22	50104,49	18,06
2036,242	13	49110,07	9,080	1994,462	23	50138,83	19,05 ⁵
2026,241	14	49352,47	10,040	1993,293	24	50168,24	20,05 ⁵
2018,716	15	49536,43	11,014	1992,290	25	50193,50	21,05 ⁵

Expérience

A la température de 2030°C, deux cents raies nouvelles ont été mesurées dans le domaine de longueurs d'onde 2280-3000 Å. Certaines raies possèdent une structure hyperfine très large, à deux composantes presque résolues, dont la position du centre de gravité est repérée dans la liste 6 par les lettres CG.

Interprétation

La photographie 2 représente une portion du spectre entre 2280 Å et 2480 Å. On remarque immédiatement deux suites de raies dont les limites ont une différence d'énergie correspondant à l'écart du doublet fondamental 2D de $5d6s^2$, soit 1994 cm^{-1} . Ces raies sont identifiées avec les transitions des séries $5d \ ^2D - nf \ ^2F$ et $5d \ ^2D - np \ ^2P$. Deux autres séries, d'intensité plus faible, dont les limites sont situées vers 2520 Å et 2750 Å, correspondant aux transitions $6p \ ^2P - ns \ ^2S$ et $6p \ ^2P - nd \ ^2D$. Les transitions partent des deux premiers niveaux impairs, $^2P_{1/2}$ et $^2P_{3/2}$, de $6p6s^2$.

La position des termes identifiés $ns \ ^2S$, $np \ ^2P$, $nd \ ^2D$ et $nf \ ^2F$ de Lu I est portée sur le diagramme de Grotrian de la figure 21. Les séries sont désignées, dans la suite, par les lettres capitales correspondantes de la figure 21. Chaque niveau d'une série, suivant sa valeur J, possède une ou deux combinaisons possibles avec les niveaux profonds $5d \ ^2D$ et $6p \ ^2P$. La série A, par exemple, est constituée d'une suite de couples de raies, distantes de $1993,92 \text{ cm}^{-1}$. Ces raies correspondent aux transitions $5d \ ^2D_{3/2} - nf \ ^2F_{5/2}$ et $5d \ ^2D_{5/2} - nf \ ^2F_{5/2}$, notées nA_1 et nA_2 sur la photographie.

Au total, six séries de termes (A, B, C, D, E, F), dont quatre doubles (A, D, E, F) ont été identifiées et étudiées pour la première fois.

LISTE 6 SPECTRE D'ABSORPTION DU LUTECIUM.

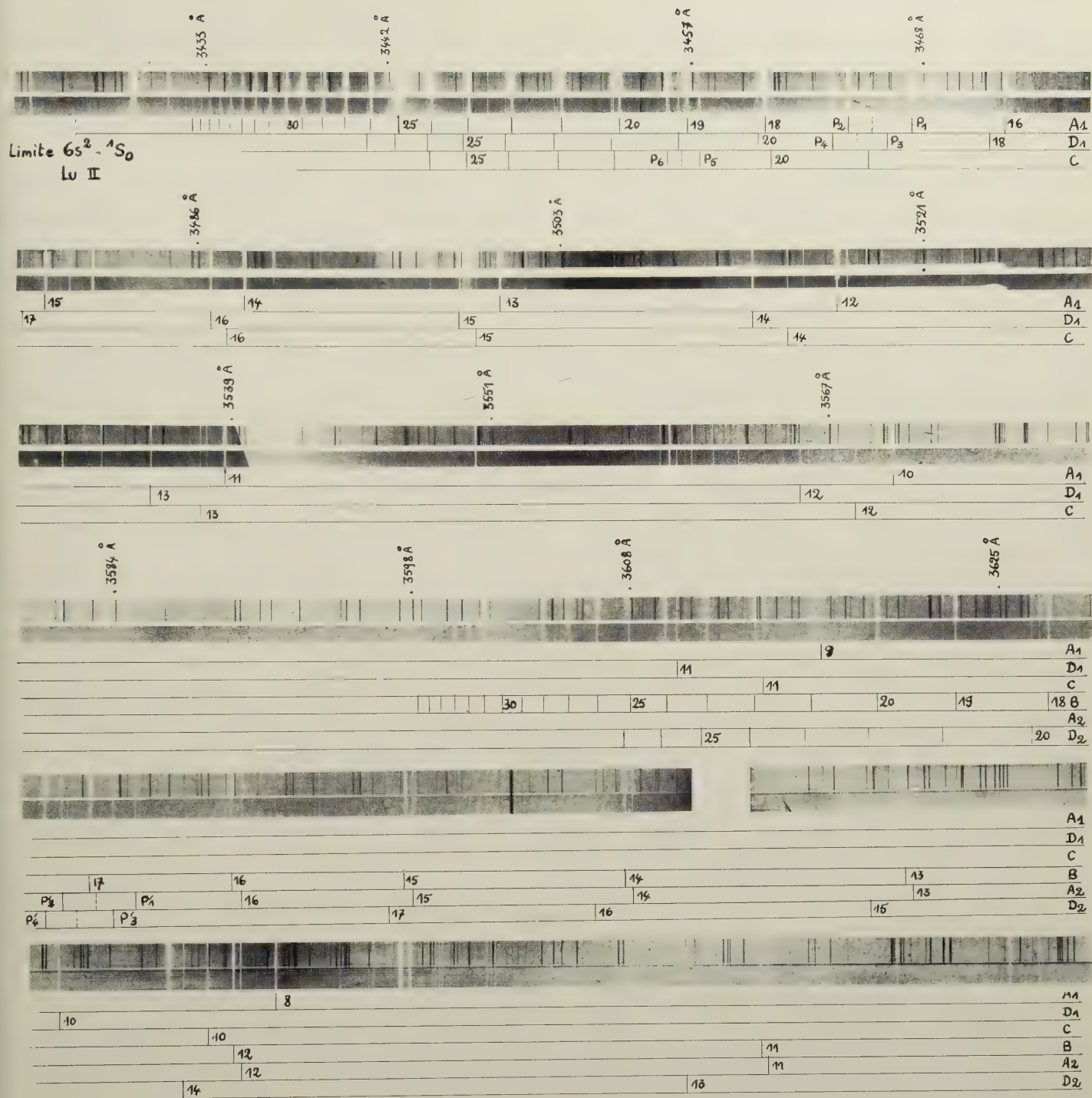
LONG. ONDE (Å)	I	NOMB. ONDES (CM ⁻¹)	CLASSIFICATION
2971.438	2	33643.92	7476* 3/2 -41120 1/2
2949.683	3	33892.04	7476* 3/2 -41368 1/2, 3/2
2912.751	2	34321.75	7476* 3/2 -41798 1/2
2886.040	1	34639.40	1993 5/2 -36633* 5/2
2881.600	1	34692.77	4136* 1/2 -38828 3/2
2860.078	1	34953.81	7476* 3/2 -42430 3/2
2845.130	6	35137.45	1993 5/2 -37131* 3/2
2842.278	2	35172.70	7476* 3/2 -42649 1/2
2836.355	1	35246.15	7476* 3/2 -42722 3/2
2824.283	1	35396.80	7476* 3/2 -42873 3/2
2813.530	1	35532.07	7476* 3/2 -43008 3/2
2805.289	1	35636.45	7476* 3/2 -43112 3/2
2795.573	1	35760.30	7476* 3/2 -43236 3/2
2791.323	1	35814.75	7476* 3/2 -43291 3/2
2787.192	1	35867.83	7476* 3/2 -43344 3/2
2783.617	1	35913.89	7476* 3/2 -43390 3/2
2780.574	1	35953.19	7476* 3/2 -43429 3/2
2777.981	1	35986.75	7476* 3/2 -43463 3/2
2728.945	4	36633.37	0 3/2 -36633* 5/2
2722.991	1	36713.44	
2719.172	4	36765.01	4136* 1/2 -40901 3/2
2703.050	3D	36984.27	4136* 1/2 -41120 1/2
2692.344	3L	37131.34	0 3/2 -37131* 3/2
2686.027	2L	37218.65	1993 5/2 -39212* 5/2
2685.478	4L	37226.26	1993 5/2 -39220* 7/2
2685.036	5L	37232.39	4136* 1/2 -41368 1/2, 3/2
2677.246	5L	37340.72	7476* 3/2 -44816 1/2, 3/2
2670.806	3L	37430.75	1993 5/2 -39424* 3/2
2668.047	4L	37469.46	4136* 1/2 -41605 3/2
2654.399	1D	37662.10	4136* 1/2 -41798 1/2
2633.823	3L	37956.30	4136* 1/2 -42092 3/2
2615.412	3	38223.48	4136* 1/2 -42359 1/2
2610.584	3	38294.16	4136* 1/2 -42430 3/2
2595.747	1	38513.05	4136* 1/2 -42649 1/2
2592.201	3L	38565.72	1993 5/2 -40559* 3/2, 5/2
2590.805	3L	38586.50	4136* 1/2 -42722 3/2
2588.216	3L	38625.09	1993 5/2 -40619* 7/2
2587.694	1	38632.88	1993 5/2 -40626* 5/2
2580.728	3L	38737.15	4136* 1/2 -42873 3/2
2580.446	2	38741.38	1993 5/2 -40735* 3/2
2575.092	1L	38821.94	
2571.747	3L	38872.42	4136* 1/2 -43008 3/2
2564.860	2L	38976.80	4136* 1/2 -43112 3/2
2556.735	3L	39100.65	4136* 1/2 -43236 3/2
2553.179	3L	39155.10	4136* 1/2 -43291 3/2

LONG. ONDES (A)	I	NOMB. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION			
2549.723	3L	39208.18	4136*	1/2	-43344	3/2
2549.435	3L	39212.61	0	3/2	-39212*	5/2
2546.731	3L	39254.24	4136*	1/2	-43390	3/2
2544.189	1	39293.46				
2544.178	CG	39293.54	4136*	1/2	-43429	3/2
2544.174	1	39293.62				
2542.337	1	39322.08				
2542.345	CG	39321.96	0	3/2	-39322*	1/2
2542.356	1	39321.78				
2542.012	3L	39327.10	4136*	1/2	-43463	3/2
2540.154	3L	39355.88	4136*	1/2	-43491	3/2
2538.548	3L	39380.76	4136*	1/2	-43516	3/2
2537.153	2L	39402.42	4136*	1/2	-43538	3/2
2535.938	2L	39421.30	4136*	1/2	-43557	3/2
2535.720	3	39424.68	0	3/2	-39424*	3/2
2534.868	2	39437.94	4136*	1/2	-43573	3/2
2533.920	2	39452.68	4136*	1/2	-43588	3/2
2533.297	3	39462.39	1993	5/2	-41456*	5/2
2533.083	2	39465.73	4136*	1/2	-43601	3/2
2533.055	3L	39466.16	1993	5/2	-41460*	7/2
2532.340	2	39477.30	4136*	1/2	-43613	3/2
2531.666	1	39487.82	4136*	1/2	-43623	3/2
2531.062	1	39497.23	4136*	1/2	-43633	3/2
2530.514	1	39505.79	4136*	1/2	-43641	3/2
2530.046	1	39513.10	4136*	1/2	-43649	3/2
2528.363	3	39539.39	1993	5/2	-41533*	3/2
2500.867	3	39974.07				
2498.823	3	40006.78	1993	5/2	-42000*	5/2
2498.492	4L	40012.07	1993	5/2	-42006*	7/2
2495.569	2	40058.95	1993	5/2	-42052*	3/2
2476.415	1	40368.76				
2476.404	CG	40368.94	0	3/2	-40368*	1/2, 3/2
2476.397	1	40369.05				
2475.785	2	40379.03	1993	5/2	-42372*	5/2
2475.557	4L	40382.74	1993	5/2	-42376*	7/2
2473.222	3	40420.88	1993	5/2	-42414*	3/2
2464.772	1	40559.44				
2464.756	CG	40559.63	0	3/2	-40559*	3/2, 5/2
2464.753	1	40559.75				
2460.684	3	40626.82	0	3/2	-40626*	5/2
2459.610	2	40644.56	1993	5/2	-42638*	5/2
2459.393	4L	40648.13	1993	5/2	-42642*	7/2
2458.613	3	40661.02	0	3/2	-40661*	1/2
2457.881	2	40673.13	1993	5/2	-42667*	3/2
2457.413	2L	40680.89	4136*	1/2	-44816	1/2, 3/2

LONG. ONDE (A)	I	NOMB. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION			
2454.128	3	40735.33	0	3/2	-40735.	3/2
2447.809	2	40840.48	1993	5/2	-42834.	5/2
2447.594	4L	40844.07	1993	5/2	-42838.	7/2
2446.522	2	40861.97	1993	5/2	-42855.	3/2
2438.949	2	40988.93	1993	5/2	-42982.	5/2
2438.932	2	40989.12				
2438.715	4L	40992.77	1993	5/2	-42986.	7/2
2438.656	1	40993.76				
2438.642	CG	40994.00				
2438.629	1	40994.22				
2437.775	2	41008.57	1993	5/2	-43002.	3/2
2432.097	2	41104.30	1993	5/2	-43098.	5/2
2431.855	4L	41108.39	1993	5/2	-43102.	7/2
2431.300	1	41117.75	1993	5/2	-43111.	3/2
2429.192	2L	41153.45				
2426.781	3	41194.34	1993	5/2	-43188.	5/2
2426.482	1	41199.41				
2426.452	4L	41199.93	1993	5/2	-43193.	7/2
2423.502	2	41250.08	1993	5/2	-43244.	5/2
2422.817	3L	41261.73	1993	5/2	-43255.	3/2
2422.117	4L	41273.65	1993	5/2	-43267.	7/2
2421.246	2	41288.51	1993	5/2	-43282.	5/2
2420.717	5L	41297.53	1993	5/2	-43291.	3/2
2418.585	4L	41333.92	1993	5/2	-43327.	7/2
2418.304	2	41338.73	1993	5/2	-43332.	5/2
2418.061	2	41342.89	1993	5/2	-43336.	3/2
2415.669	4L	41383.82	1993	5/2	-43377.	7/2
2415.271	2	41390.64	1993	5/2	-43384.	3/2
2413.231	4L	41425.62	1993	5/2	-43419.	7/2
2412.911	2	41431.12	1993	5/2	-43425.	3/2
2411.447	4L	41456.26	0	3/2	-41456.	5/2
2411.175	3L	41460.95	1993	5/2	-43454.	7/2
2410.911	1	41465.48	1993	5/2	-43459.	3/2
2409.659	2	41487.02	0	3/2	-41487.	1/2
2409.423	3L	41491.09	1993	5/2	-43485.	7/2
2409.198	1	41494.97	1993	5/2	-43488.	3/2
2407.919	3L	41517.01	1993	5/2	-43510.	7/2
2407.727	1	41520.32	1993	5/2	-43514.	3/2
2406.974	2	41533.30	0	3/2	-41533.	3/2
2406.617	3L	41539.46	1993	5/2	-43533.	7/2
2406.456	1	41542.24	1993	5/2	-43536.	3/2
2405.484	2L	41559.03	1993	5/2	-43552.	7/2
2405.345	1	41561.44	1993	5/2	-43555.	3/2
2404.490	2L	41576.21	1993	5/2	-43570.	7/2
2403.615	2L	41591.35	1993	5/2	-43585.	7/2

LONG. ONDE (A)	I	NOMB. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION			
2402.840	2L	41604.76	1993	5/2	-43598*	7/2
2402.148	2L	41616.74	1993	5/2	-43610*	7/2
2401.535	2L	41627.36	1993	5/2	-43621*	7/2
2400.981	2L	41636.96	1993	5/2	-43630*	7/2
2400.480	2D	41645.66	1993	5/2	-43659*	7/2
2400.032	2D	41653.42	1993	5/2	-43647*	7/2
2399.622	1D	41660.55	1993	5/2	-43654*	7/2
2399.248	1D	41667.03	1993	5/2	-43660*	7/2
2398.919	1D	41672.93	1993	5/2	-43666*	7/2
2380.185	4L	42000.72	n	3/2	-42000*	5/2
2378.989	2	42021.84	0	3/2	-42021*	1/2
2377.232	2	42052.89	0	3/2	-42052*	3/2
2373.822	1	42113.30				
2373.121	2L	42125.74				
2367.052	2L	42233.74				
2359.275	4L	42372.94	0	3/2	-42372*	5/2
2358.506	2	42386.76	0	3/2	-42386*	1/2
2356.947	2	42414.79	0	3/2	-42414*	3/2
2355.396	1	42442.71				
2354.174	1	42464.75				
2345.542	1	42621.00				
2344.917	1	42632.37				
2344.581	3L	42638.48	0	3/2	-42638*	5/2
2343.525	1	42657.69	0	3/2	-42657*	1/2
2343.010	2	42667.06	0	3/2	-42667*	3/2
2341.882	1D	42687.62				
2341.888	CG	42687.50				
2341.894	1D	42687.40				
2333.099	1	42848.31	0	3/2	-42848*	1/2
2333.855	3L	42834.43	0	3/2	-42834*	5/2
2332.685	1	42855.91	0	3/2	-42855*	3/2
2332.579	1	42857.86				
2325.798	5L	42982.79	0	3/2	-42982*	5/2
2324.731	2	43002.52	0	3/2	-43002*	3/2
2321.039	4L	43070.92				
2319.573	3L	43098.15	0	3/2	-43098*	5/2
2318.844	1	43111.69	0	3/2	-43111*	3/2
2314.731	3L	43188.28	0	3/2	-43188*	5/2
2314.260	3	43197.07	0	3/2	-43197*	3/2
2311.747	4L	43244.02	0	3/2	-43244*	5/2
2311.125	3	43255.67	0	3/2	-43255*	3/2
2310.962	1	43258.71	0	3/2	-43258*	1/2
2309.695	3	43282.45	0	3/2	-43282*	5/2
2309.215	4L	43291.45	0	3/2	-43291*	3/2
2307.242	1	43328.46	0	3/2	-43328*	1/2

LONG. ONDE (A)	1	NOMB. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION		
2307.036	2	43332.33			
2307.023	CG	43332.57	0	3/2	-43332* 5/2
2307.017	4	43332.69			
2306.774	2	43336.86	0	3/2	-43336* 3/2
2304.921	3	43372.08	0	3/2	-43372* 1/2
2304.537	4L	43379.31	0	3/2	-43379* 5/2
2304.258	1	43384.56	0	3/2	-43384* 3/2
2303.894	4L	43391.42	0	3/2	-43391* 1/2
2302.369	4L	43420.16	0	3/2	-43420* 5/2
2302.173	1	43423.85	0	3/2	-43423* 1/2
2302.108	2	43425.08	0	3/2	-43425* 3/2
2300.518	3L	43455.08	0	3/2	-43455* 5/2
2300.382	1	43457.65	0	3/2	-43457* 1/2
2300.286	1	43459.47	0	3/2	-43459* 3/2
2298.935	3L	43485.01	0	3/2	-43485* 5/2
2298.822	1	43487.15	0	3/2	-43487* 1/2
2298.729	1	43488.91	0	3/2	-43488* 3/2
2297.572	2L	43510.91	0	3/2	-43510* 5/2
2297.474	1	43512.65	0	3/2	-43512* 1/2
2297.388	1	43514.29	0	3/2	-43514* 3/2
2296.391	2L	43533.18	0	3/2	-43533* 5/2
2296.300	10	43534.90	0	3/2	-43534* 1/2
2296.230	1	43536.23	0	3/2	-43536* 3/2
2295.361	2L	43552.71	0	3/2	-43552* 5/2
2295.725	1	43555.28	0	3/2	-43555* 3/2
2294.458	2L	43569.85	0	3/2	-43569* 5/2
2293.661	2L	43584.98	0	3/2	-43584* 5/2
2292.955	2L	43598.40	0	3/2	-43598* 5/2
2292.327	2L	43610.34	0	3/2	-43610* 5/2
2291.766	1L	43621.02	0	3/2	-43621* 5/2
2291.261	1L	43630.64	0	3/2	-43630* 5/2
2290.806	1L	43639.31	0	3/2	-43639* 5/2
2290.395	10	43647.13	0	3/2	-43647* 5/2
2290.022	10	43654.23	0	3/2	-43654* 5/2
2289.677	10	43660.81	0	3/2	-43660* 5/2
2289.367	10	43666.72	0	3/2	-43666* 5/2



Photographie 2. Séries de Rydberg $5d^2D - np^2P$ et $5d^2D - nf^2F$ dans Lu I.

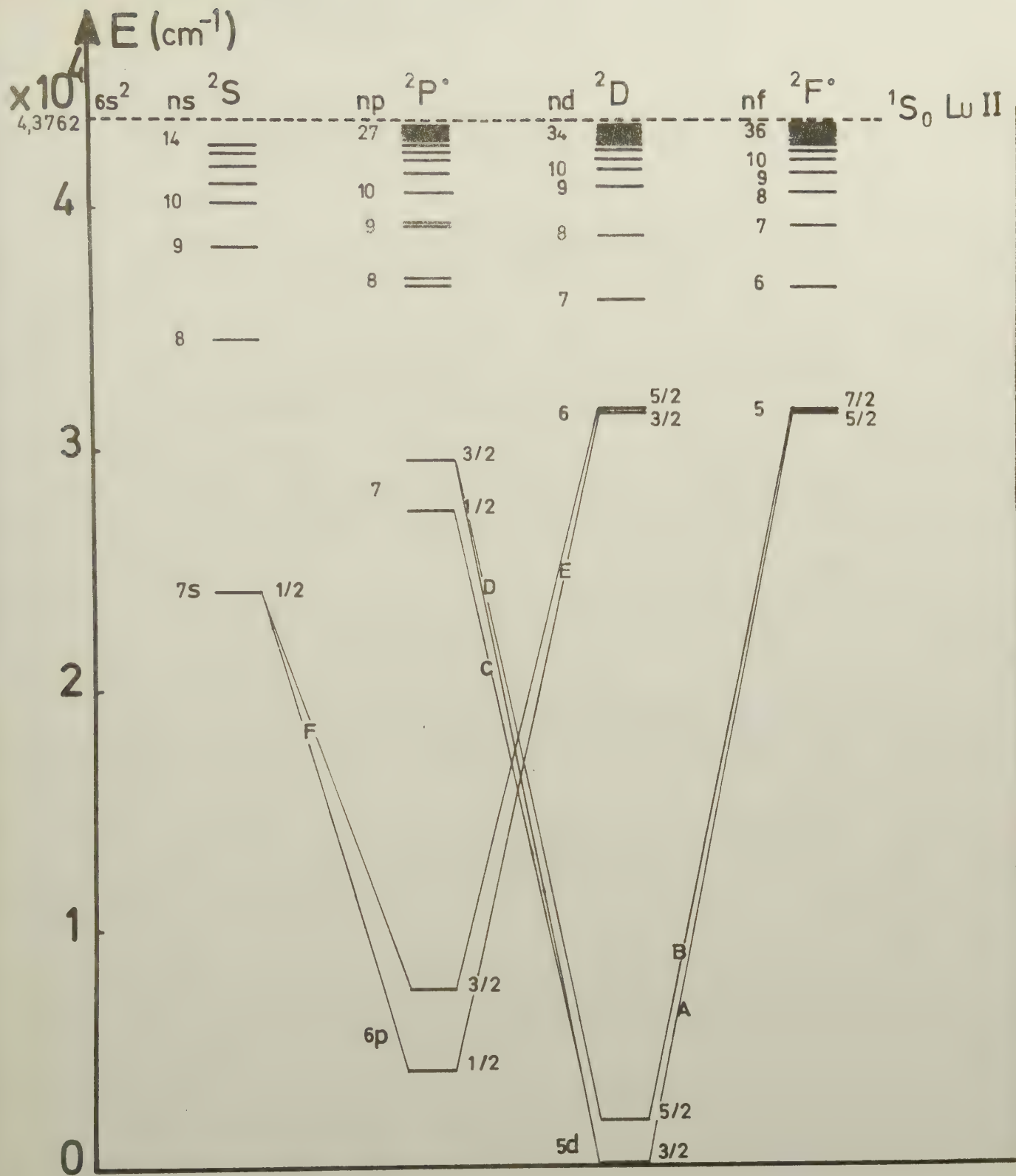


fig. 21

- Diagramme de Grotrian du Lu I. -

La valeur n maximum observée pour chaque type d'électron nl est indiqué sur la figure 21; elle augmente en même temps que le nombre quantique orbital l , les transitions $5d - nf$ (séries A_1 , A_2 et B de la photographie 2) étant, de loin, les plus intenses du spectre.

Chaque terme de ces séries nl ($n \geq l$) est formé de deux niveaux dont la distance, égale à $\frac{2l+1}{2} \zeta_{nl}$, tend vers zéro quand n augmente. La limite commune de ces séries est le niveau fondamental $6s^2 \ ^1S_0$ du Lu II.

La série B est quasiment exempte de perturbations comme le montrent les résultats du programme d'ajustement du défaut quantique dans les tableaux 32 et 33. Un polynôme de degré 1 en e_n est suffisant pour interpréter la variation du défaut quantique entre les termes 12 et 36f. Nous adopterons donc pour limite de la série $5d \ ^2D_{5/2} - nf \ ^2F_{7/2}$, la valeur :

$$43762,39 \pm 0,10 \text{ cm}^{-1}.$$

Les tables 14 à 19 récapitulent les énergies des termes et les longueurs d'onde des séries observées. Les nombres quantiques effectifs n^* sont calculés d'après la limite commune à toutes ces séries, fixée à $43762,39 \text{ cm}^{-1}$.

La figure 22 représente les variations des défauts quantiques μ_n , en fonction de l'énergie réduite t . La série A est très perturbée entre 16A et 18A. Les deux raies marquées P_1 et P_2 sur la reproduction photographique 2, aboutissent à deux niveaux $J = 5/2$, 42344 et 43282 cm^{-1} dont le centre de gravité (repéré en pointillé) se trouve à quelques cm^{-1} de la position non perturbée du terme $17f \ ^2F_{5/2}$. Pour montrer les effets de cette perturbation sur la position des termes voisins, nous avons tracé sur la figure 23 la distance observée entre les niveaux $^2F_{7/2}$ et $^2F_{5/2}$ de chaque terme de nf . De 18 à 21f, le niveau $^2F_{5/2}$ est situé au-dessus du niveau $^2F_{7/2}$ (pris comme zéro) : ce qui est contraire à la règle de Landé.

TABLEAU 32

AJUSTEMENT DU DEF AUT QUANTIQUE

LUTETIUM SERIE B

N	DELTA T	RMSDT •285	C(1) •27283-05	C(2) •21074+01	C(3) •51138+00	C(4) -•66667+01	C(5) •21032+03	C(6) -•16951+04	No(OBS)	DQ(OBS)	No(CALC)	DQ(CALC)	Dn(C=O)
5	•00035	31579•170	31579•170	12183•129	12183•129	-•11102	1•99879	3•00121	3•00121	1•99879	3•00121	1•99879	•00000
6	•01027	36644•120	36644•130	7118•179	7118•169	-•06487	2•07362	3•92638	3•92638	2•07362	3•92638	2•07362	•00000
7	-•11626	39220•170	39220•054	4542•129	4542•246	-•04139	2•08480	4•91520	4•91520	2•08474	4•91526	2•08474	-•00006
8	•28769	40619•010	40619•297	3143•290	3143•002	-•02864	2•09113	5•90887	5•90887	2•09140	5•90860	2•09140	•00027
9	•37459	41460•080	41460•455	2302•219	2301•845	-•02078	2•09540	6•90460	6•90460	2•09596	6•90404	2•09596	•00056
10	-•12753	42006•000	42004•729	1756•299	1757•571	-•01602	2•09831	7•90169	7•90169	2•09545	7•90455	2•09545	-•00286
11	•14977	42376•660	42376•810	1385•639	1385•490	-•01263	2•10031	8•89969	8•89969	2•10079	8•89921	2•10079	•00048
12	•20511	42642•050	42642•255	1120•250	1120•044	-•01021	2•10174	9•89826	9•89826	2•10265	9•89735	2•10265	•00091
13	•20257	42837•990	42838•192	924•309	924•107	-•00842	2•10279	10•89721	10•89721	2•10398	10•89602	2•10398	•00119
14	•22007	42986•690	42986•910	775•609	775•390	-•00707	2•10357	11•89643	11•89643	2•10526	11•89474	2•10526	•00169
15	•12476	43102•310	43102•435	659•989	659•865	-•00601	2•10418	12•89582	12•89582	2•10539	12•89461	2•10539	•00122
16	•10177	43193•850	43193•952	568•449	568•348	-•00518	2•10465	13•89535	13•89535	2•10589	13•89411	2•10589	•00124
17	•10743	43267•570	43267•677	494•729	494•622	-•00451	2•10503	14•89497	14•89497	2•10664	14•89336	2•10664	•00162
18	•09926	43327•840	43327•939	434•459	434•360	-•00396	2•10533	15•89467	15•89467	2•10715	15•89285	2•10715	•00181
19	•08546	43377•740	43377•826	384•559	384•474	-•00350	2•10558	16•89442	16•89442	2•10746	16•89254	2•10746	•00188
20	•04832	43419•540	43419•588	342•759	342•711	-•00312	2•10579	17•89421	17•89421	2•10705	17•89295	2•10705	•00126
21	•02937	43454•870	43454•899	307•429	307•400	-•00280	2•10597	18•89403	18•89403	2•10687	18•89313	2•10687	•00090
22	•01259	43485•010	43485•022	277•290	277•277	-•00253	2•10612	19•89388	19•89388	2•10657	19•89343	2•10657	•00045
23	-•00458	43510•930	43510•926	251•369	251•374	-•00229	2•10625	20•89375	20•89375	2•10605	20•89395	2•10605	-•00019
24	-•01795	43533•380	43533•362	228•919	228•937	-•00209	2•10636	21•89364	21•89364	2•10549	21•89451	2•10549	-•00086
25	-•02672	43552•950	43552•924	209•349	209•375	-•00191	2•10645	22•89355	22•89355	2•10499	22•89501	2•10499	-•00147
26	-•04877	43570•130	43570•082	192•169	192•218	-•00175	2•10654	23•89347	23•89347	2•10350	23•89650	2•10350	-•00304
27	-•05687	43585•270	43585•213	177•029	177•086	-•00161	2•10661	24•89339	24•89339	2•10261	24•89739	2•10261	-•00400
28	-•05386	43598•680	43598•626	163•619	163•673	-•00149	2•10667	25•89333	25•89333	2•10241	25•89759	2•10241	-•00427
29	-•08877	43610•660	43610•572	151•639	151•728	-•00138	2•10673	26•89327	26•89327	2•09885	26•90115	2•09885	-•00788
30	-•02475	43621•280	43621•255	141•020	141•044	-•00129	2•10678	27•89322	27•89322	2•10433	27•89567	2•10433	-•00246
31	-•03108	43630•880	43630•849	131•419	131•450	-•00120	2•10683	28•89317	28•89317	2•10340	28•89660	2•10340	-•00342
32	-•08403	43639•580	43639•496	122•719	122•803	-•00112	2•10687	29•89313	29•89313	2•09663	29•90337	2•09663	-•01024
33	-•02253	43647•340	43647•317	114•959	114•982	-•00105	2•10691	30•89309	30•89309	2•10387	30•89613	2•10387	-•00304
34	-•05571	43654•470	43654•415	107•829	107•885	-•00098	2•10694	31•89306	31•89306	2•09869	31•90131	2•09869	-•00825
35	-•07586	43660•950	43660•875	101•349	101•425	-•00092	2•10697	32•89303	32•89303	2•09465	32•90535	2•09465	-•01232
36	-•07920	43666•850	43666•771	95•449	95•528	-•00087	2•10700	33•89300	33•89300	2•09293	33•90707	2•09293	-•01407

TABLEAU 33

AJUSTEMENT DU DEF AUT QUANT, QUE

LUTETIUM SERIE B

[illegible]

TABLE 14

Lu I - Séries A : $5d\ ^2D - nf\ ^2F_{5/2}^{\circ}$ - Limite : $43762,39\text{ cm}^{-1}$ -

Série A ₁		Série A ₂		n	E _n (obs) (cm ⁻¹)	n *
$5d\ ^2D_{3/2} - nf\ ^2F_{5/2}^{\circ}$	$\lambda\ (\text{\AA})$	$5d\ ^2D_{5/2} - nf\ ^2F_{5/2}^{\circ}$	$\lambda\ (\text{\AA})$			
3171,36		3385,53		5	31523,14	2,99433
2728,945		2886,040		6	36633,36	3,92339
2549,435		2686,027		7	39212,61	4,91113
2460,684		2587,694		8	40626,82	5,9159
2411,447		2533,297		9	41456,26	6,8982
2380,185		2498,823		10	42000,72	7,8925
2359,275		2475,785		11	42372,94	8,8870
2344,581		2459,610		12	42638,48	9,8812
2333,855		2447,809		13	42834,43	10,8746
2325,798		2438,949		14	42982,79	11,8643
2319,573		2432,097		15	43098,15	12,8533
2314,731		2426,781		16	43188,28	13,8255
		-		17	perturbé	-
2307,023		2418,304		18	43332,57	15,978
2304,537				19	43379,31	16,925
2302,369				20	43420,16	17,907
2300,518				21	43455,08	18,897
2298,935				22	43485,01	19,890
2297,572				23	43510,81	20,885
2296,391				24	43533,18	21,881
2295,361				25	43552,71	22,877
2294,458				26	43569,85	23,873
2293,661				27	43584,98	24,871
2292,955				28	43598,40	25,868
2292,327				29	43610,34	26,865
2291,766				30	43621,02	27,86
2291,261				31	43630,64	28,86
2290,806				32	43639,31	29,86
2290,395				33	43647,13	30,86
2290,022				34	43654,23	31,85
2289,677				35	43660,81	32,87
2289,367				36	43666,72	33,87

TABLE 15

Lu I : Série B - $5d^2_{5/2} - nf^2_{7/2}$ -

Limite : $43762,39 \text{ cm}^{-1}$

λ (Å)	n	E_n (obs) (cm^{-1})	n *	λ (Å)	n	E_n (obs) (cm^{-1})	n *
3379,092	5	31579,17	3,00121	2411,175	21	43454,87	18,890 ₅
2885,14	6	36644,12	3,92636	2409,423	22	43485,01	19,890
2685,478	7	39220,17	4,91522	2407,919	23	43510,93	20,890
2588,216	8	40619,01	5,9085	2406,617	24	43533,38	21,890
2533,055	9	41460,08	6,9039	2405,484	25	43552,95	22,890
2498,492	10	42006,00	7,9043	2404,490	26	43570,13	23,891
2475,557	11	42376,66	8,8989	2403,615	27	43585,27	24,891
2459,393	12	42642,05	9,8970	2402,840	28	43598,68	25,890 ₅
2447,594	13	42837,99	10,8955	2402,148	29	43610,66	26,890
2438,715	14	42986,69	11,8941	2401,535	30	43621,28	27,89
2431,855	15	43102,31	12,8937	2400,981	31	43630,88	28,89
2426,452	16	43193,85	13,8930	2400,480	32	43639,58	29,89
2422,117	17	43267,57	14,8920	2400,032	33	43647,34	30,89
2418,585	18	43327,84	15,891	2399,622	34	43654,47	31,89
2415,669	19	43377,74	16,890 ₅	2399,248	35	43660,95	32,89
2413,231	20	43419,54	17,890 ₅	2398,919	36	43666,85	33,89

TABLE 16

Iu I - Série C : $5d \ ^2D_{3/2} - np \ ^2P_{1/2}^o$

Limite : $43762,39 \text{ cm}^{-1}$

λ (Å)	n	E_n (obs) (cm^{-1})	n *
24171,3	6	4136,00	1,664121
3636,25	7	27493,02	2,59712
2715,94	8	36808,76	3,97257
2542,345	9	39321,96	4,97124
2458,613	10	40661,02	5,9484
2409,659	11	41487,02	6,9447
2378,989	12	42021,84	7,9402
2358,506	13	42386,76	8,9315
2343,525	14	42657,69	9,9668
2333,099	15	42848,31	10,9568
-	16	-	-
-	17	-	-
-	18	-	-
2310,962	19	43258,71	14,7605
2307,036	20	43328,46	15,902
-	21	-	-
2302,173	22	43423,85	18,004
2300,382	23	43457,65	18,976
2298,822	24	43487,15	19,967
2297,474	25	43512,65	20,962
2296,300	26	43534,90	21,963

TABLE 17

Lu I - Séries D : $5d\ ^2D - np\ ^2P_{3/2}^{\circ}$ - Limite : $43762,39\text{ cm}^{-1}$

Série D ₁		Série D ₂		n	E _n (obs) (cm ⁻¹)	n*
$5d\ ^2D_{3/2} - np\ ^2P_{3/2}^{\circ}$	$\lambda(\text{\AA})$	$5d\ ^2D_{5/2} - np\ ^2P_{3/2}^{\circ}$	$\lambda(\text{\AA})$			
13371,85		18235,10		6	7476,35	1,739031
3376,51		3620,31		7	29607,96	2,78440
2692,35		2845,13		8	37131,38	4,06806
2535,720		2670,806		9	39424,68	5,02975
2454,128		2580,446		10	40735,33	6,0210
2406,974		2528,363		11	41533,30	7,0164
2377,232		2495,569		12	42052,89	8,0120
2473,222		2356,947		13	42414,79	9,0239
2343,010		2457,881		14	42667,06	10,0093
2332,685		2446,522		15	42855,91	11,0027
2324,731		2437,775		16	43002,55	12,0175
2318,844		2431,300		17	43111,69	12,9863
2314,260		-----		18	43197,07	13,9325
-		-		19	Perturbé	-
2306,794		2418,061		20	43306,86	16,059
2304,258		2415,271		21	43384,56	17,042
2302,108		2412,911		22	43425,08	18,037
2300,286		2410,911		23	43459,47	19,033
2298,729		2409,198		24	43488,91	20,032
2297,388		2407,727		25	43514,29	21,031
2296,230		2406,456		26	43536,23	22,028
2295,225		2405,345		27	43555,28	23,018

TABLE 18

Lu I - Séries E : $6p \ ^2P^\circ - nd \ ^2D_{3/2}$ - Limite : $43762,39 \text{ cm}^{-1}$

Série E ₁	Série E ₂			
$6p \ ^2P^\circ_{1/2} - nd \ ^2D_{3/2}$	$6p \ ^2P^\circ_{3/2} - nd \ ^2D_{3/2}$	n	E _n (obs)	n*
$\lambda \text{ (Å)}$	$\lambda \text{ (Å)}$		(cm^{-1})	
3647,77	4154,08	6	31542,24	2,99667
3118,43	-	7	36114,12	3,80784
2881,60	-	8	38828,77	4,71622
2719,172	-	9	40901,01	6,1928
2668,047	-	10	41605,46	7,1328
2633,823	-	11	42092,30	8,1060
2610,584	2860,078	12	42430,16	9,0758
2590,805	2836,355	13	42722,50	10,2727
2580,728	2824,283	14	42873,15	11,1088
2571,747	2813,530	15	43008,42	12,0642
2564,860	2805,289	16	43112,80	12,9974
2556,735	2795,573	17	43236,65	14,4474
2553,179	2791,323	18	43291,10	15,259
2549,723	2787,192	19	43344,18	16,199
2546,731	2783,617	20	43390,24	17,172
2544,178	2780,574	21	43429,54	18,157
2542,012	2777,981	22	43463,10	19,148
2540,154	-	23	43491,88	20,141
2538,548	-	24	43516,76	21,137
2537,153	-	25	43538,42	22,135
2535,938	-	26	43557,30	23,132
2534,868	-	27	43573,94	24,131

TABLE 18 (suite)

2533,920	-	28	43588,68	25,134
2533,083	-	29	43601,73	26,135
2532,340	-	30	43613,30	27,130
2531,666	-	31	43623,82	28,141
2531,062	-	32	43633,23	29,148
2530,514	-	33	43641,79	30,165
2530,046	-	34	43649,10	31,123

TABLE 19

Lu I - Séries F : $6p \ ^2P^\circ - ns \ ^2S_{1/2} -$

Limite : $43762,39 \text{ cm}^{-1}$

Série F ₁ $6p \ ^2P^\circ_{1/2} - ns \ ^2S_{1/2}$	Série F ₂ $6p \ ^2P^\circ_{3/2} - ns \ ^2S_{1/2}$	n	E _n (obs) (cm ⁻¹)	n*
5001,14	6004,52	7	24125,86	2,36400
3280,50	3684,32	8	34610,38	3,46273
2912,70	-	9	38458,36	4,54856
2765,74	3047,36	10	40282,01	5,6152
2703,050	2971,438	11	41120,27	6,4447
2654,399	2912,751	12	41798,10	7,4744
2615,412	-	13	42359,48	8,8443
2595,747	2842,278	14	42649,05	9,9280

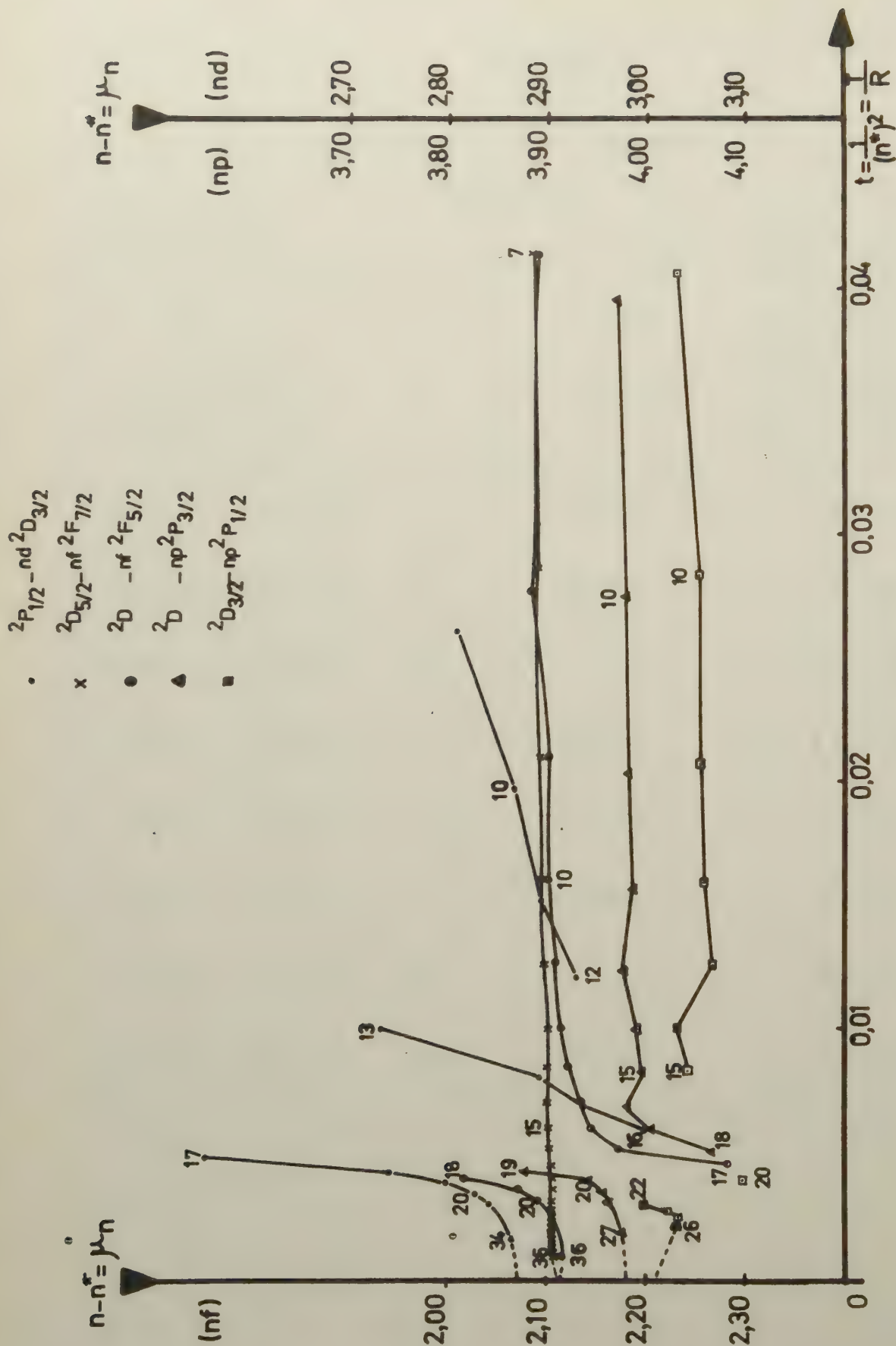


fig. 22

- Variation du défaut quantique μ_n pour les séries de Rydberg $nl \ 6s^2$ du Lu I -

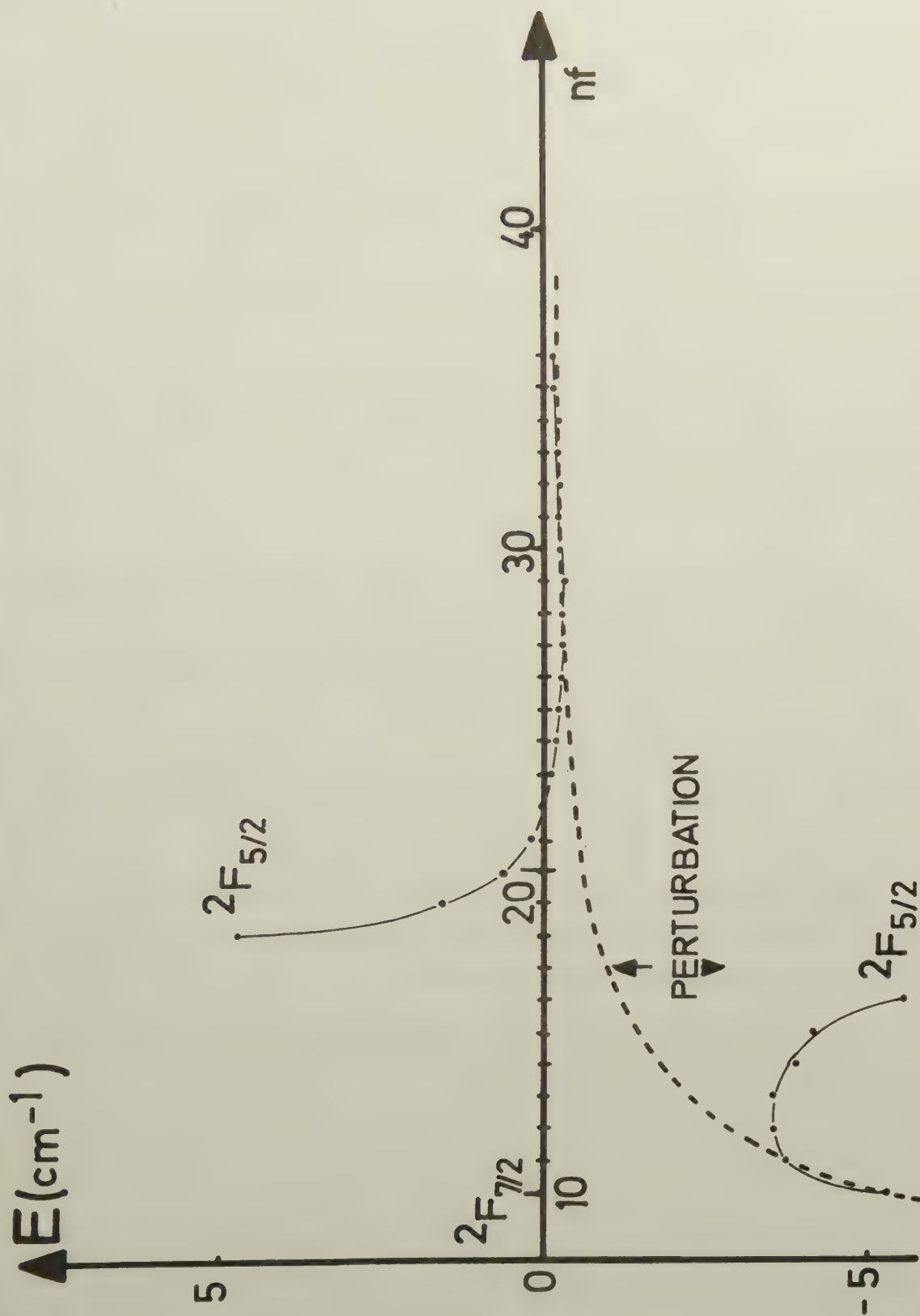


fig. 23

- Distance entre les niveaux $2F_{7/2}$ et $2F_{5/2}$ de la série $nf6s^2$ du Lu I -

La courbe en pointillé indique la variation attendue de la distance des n niveaux 2F en dehors de toute perturbation. Une autre perturbation, semblable à la précédente, est observée pour la série D_1 ; la position prévue du niveau $19p \ ^2P_{3/2}$ est celle du centre de gravité des niveaux $J = 3/2$, 43255 et 43291 cm^{-1} (repérés par P_3 et P_4 sur la photographie 2). Les raies P_5 et P_6 indiquent que les niveaux $J = \frac{1}{2}$, 43372 et 43391 cm^{-1} sont mélangés et que la position de leur centre de gravité correspond au niveau $21p \ ^2P_{1/2}$.

Ces niveaux, étrangers aux séries $np6s^2$ et $nf6s^2$, n'ont pas reçu d'identification et peuvent appartenir à la configuration $5d6s7p$ attendue vers 41000 cm^{-1} .

TABEAU 34 - Variation du défaut quantique μ_{12} en fonction de l

Terme	$12s6s^2$	$12p6s^2$	$12d6s^2$	$12f6s^2$
μ_{12}	4,5256	3,988	2,924	2,103

Les valeurs de μ_n (tableau 34), pour les termes $n = 12$ des séries $nl6s^2$, diminuent quand l augmente, c'est-à-dire quand l'excentricité des orbites électroniques devient petite.

Certains niveaux profonds ont reçu une interprétation différente de celle donnée par P.F.A. KLINKENBERG [73] :

Niveaux pairs			Niveaux impairs		
E (cm ⁻¹)	J	Interprétation	E (cm ⁻¹)	J	Interprétation
27493,02	1/2	7p6s ² P _{1/2}	31542,24	3/2	6d6s ² ² D _{3/2}
29607,98*	3/2	7p6s ² ² P _{3/2}	40282,01	1/2	10s6s ² ² S _{1/2}
31523,14	5/2	5f6s ² ² F _{5/2}			
36633,31	5/2	6f6s ² ² F _{5/2}			

Le niveau, marqué d'un astérisque, est classé avec un J égal à 3/2 en dépit de l'interprétation faite par E.H. PINNINGTON [74] de l'effet Zeeman de la raie 3376,50 Å. Cette nouvelle valeur 3/2 est en accord avec la structure hyperfine observée par L. GÖBEL [75] dans des expériences de croisement de niveaux.

Finalement, 185 raies sur 200 ont été interprétées à l'aide des séries de Rydberg ns6s², np6s², nd6s² et nf6s². L'extrême régularité de la variation du défaut quantique μ_n de la série 5d6s² ²D_{5/2} - nf6s² ²F_{7/2} observée jusqu'à n = 36, nous a permis d'en extrapoler sa limite avec une grande précision. L'énergie d'ionisation de Lu I est donc :

43762,39 ± 0,10 cm⁻¹. Elle correspond à un potentiel d'ionisation de :

$$5,4257 \pm 0,0002 \text{ Volt.}$$

dont l'incertitude est limitée par la détermination du facteur de conversion 8065,73 ± 0,23 cm⁻¹/eV. Ce potentiel est en accord avec ceux de 5,41 ± 0,02V [76] et 5,32 ± 0,05 V [69] obtenues par ionisation de surface.

II - 3 - SPECTRE DU THULIUM

Le potentiel d'ionisation de Tm I a été déterminé en 1965 [77] à l'aide des termes 7 et 8 de la série ($f^{13}[{}^2F_{7/2}]$, $(6sns) {}^3S_1$). A la suite des observations faites dans les spectres précédents, il semble difficile de vouloir extrapoler la limite d'une série à partir d'un ou deux termes seulement. A fortiori, si la série fait intervenir des électrons ns et si les termes observés sont profonds. Afin de confirmer, les hypothèses faites par J. READER et J. SUGAR [78] sur la variation du défaut quantique entre 7s et 8s, il est important de mettre en évidence la série $f^{13}6snp$.

Expérience

A la température de 1200 °C, nous avons observé une centaine de raies dans la région 2750 - 2200 Å (première partie de la liste 7) et près de trois cents raies dans la région sous-vide 2200-2000 Å (deuxième partie de la liste 7).

Interprétation

Les règles de sélection, $\Delta j_1 = 0$ (transitions permises entre niveaux construits sur le même parent 2F du coeur f^{13}), et $\Delta S_2 = 0$ (transitions $(6s^2) {}^1S_0 - (6snp) {}^1P_1$ seules autorisées) ne sont vérifiées que dans la mesure où le couplage ($f^{13}[{}^2F]j_1$, $(snp) [S_2L_2]J_2$) reste très pur.

La première condition, $\Delta j_1 = 0$, reste toujours vraie, car la distance des deux niveaux 2F de f^{13} est fonction de l'intégrale spin-orbite ζ_{4f} , indépendante de la valeur n de l'électron p. La deuxième condition, $\Delta S_2 = 0$, est à vérifier. Elle dépend d'une part, du rapport $G_1(6s,np)/\zeta_{np}$ qui fixe la pureté en LS du groupe des électrons 6snp, d'autre part, du faible couplage de ns et np avec le coeur f^{13} comparé à celui résultant de leur interaction électrostatique mutuelle Q (6snp).

LONG. ONDE (Å)		NOMM. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION			
2661.810	3	37557.25				
2660.421	4	37576.91	0*	7/2	-37576	9/2
2650.954	3	37711.08	0*	7/2	-37711	9/2
2649.982	3	37724.82	0*	7/2	-37724	5/2
2634.512	1	37946.38	0*	7/2	-37946	9/2
2632.132	2	37980.69	0*	7/2	-37980	5/2, 7/2
2629.803	4	38014.37	0*	7/2	-38014	5/2
2622.464	5	38120.66	0*	7/2	-38120	9/2
2622.304	5	38123.08	0*	7/2	-38123	7/2
2607.291	4	38342.53	0*	7/2	-38342	7/2
2601.077	5	38433.91	0*	7/2	-38433	5/2 /A1
2596.493	5	38502.04	0*	7/2	-38502	9/2 /A1
2583.426	3	38696.72	0*	7/2	-38696	5/2
2565.353	2	38969.30				
2562.081	3	39019.09	0*	7/2	-39019	9/2
2555.271	3	39123.07	0*	7/2	-39123	9/2
2552.762	5	39161.48	0*	7/2	-39161	5/2 7A1
2549.817	4	39206.84	0*	7/2	-39206	9/2
2546.366	3	39259.86	0*	7/2	-39259	5/2
2527.865	4	39547.20	0*	7/2	-39547	5/2
2527.020	5	39560.38	0*	7/2	-39560	7/2
2525.727	4	39580.72	0*	7/2	-39580	5/2, 7/2
2518.216	2	39698.70	0*	7/2	-39698	9/2
2513.780	4	39768.69	0*	7/2	-39768	9/2
2508.847	3	39847.08	0*	7/2	-39847	7/2
2499.483	4	39996.21	0*	7/2	-39996	7/2
2495.083	2	40066.74	0*	7/2	-40066	5/2
2492.908	3	40101.69	0*	7/2	-40101	9/2
2476.926	3	40360.43	0*	7/2	-40360	7/2
2474.442	2	40400.94				
2467.383	3	40516.52	0*	7/2	-40516	9/2
2464.503	4	40563.86	0*	7/2	-40563	9/2
2459.315	3	40649.43	0*	7/2	-40649	7/2
2451.011	3	40787.15	0*	7/2	-40787	5/2
2429.715	3	41144.60	0*	7/2	-41144	7/2
2429.335	3	41151.04	0*	7/2	-41151	9/2
2409.316	4	41492.93	0*	7/2	-41492	5/2
2406.330	1	41544.43	0*	7/2	-41544	5/2
2395.750	4	41727.87	0*	7/2	-41728	9/2
2394.423	3	41751.00	0*	7/2	-41751	5/2
2389.557	4	41836.01	0*	7/2	-41836	5/2
2380.109	3	42002.30				
2372.379	3	42138.91	0*	7/2	-42138	9/2
2369.019	4	42198.68	0*	7/2	-42198	5/2
2361.908	4	42325.71	0*	7/2	-42325	7/2

FUNCTIONAL (A)	1	NOMB. INDEX (CM-1)	CLASSIFICATION
2349.836	1	42543.13	0* 7/2 -42543 7/2
2349.026	3	42575.93	0* 7/2 -42575 9/2
2345.897	4	42596.59	0* 7/2 -42596 5/2
2342.977	3	42667.30	0* 7/2 -42667 9/2
2341.480	3	42694.95	0* 7/2 -42694 5/2, 7/2
2270.196	4	42718.37	0* 7/2 -42718 7/2, 9/2
2260.701	4	42745.68	0* 7/2 -42745 5/2, 7/2
2337.666	3	42764.60	0* 7/2 -42764 9/2
2336.645	2	42783.28	0* 7/2 -42783 7/2
2331.573	3	42876.34	0* 7/2 -42876 5/2
2330.150	2	42902.53	0* 7/2 -42902 9/2
2327.171	3	42957.47	0* 7/2 -42957 5/2
2321.830	3	43056.24	0* 7/2 -43056 5/2
2319.570	3	43098.20	0* 7/2 -43098 7/2
2318.644	2	43115.40	0* 7/2 -43115 9/2
2311.800	2	43243.09	0* 7/2 -43243 5/2
2310.612	3	43265.28	
2309.176	4	43292.18	0* 7/2 -43292 9/2
2308.593	2	43303.10	0* 7/2 -43303 7/2
2307.805	4	43317.89	0* 7/2 -43318 5/2 8A1
2305.854	3	43354.53	0* 7/2 -43354 9/2
2305.686	5	43357.70	0* 7/2 -43357 9/2 8A1
2300.039	2	43464.14	0* 7/2 -43464 9/2
2299.135	4	43481.23	0* 7/2 -43481 5/2
2298.477	4	43493.68	0* 7/2 -43493 5/2, 7/2
2297.362	4	43514.40	0* 7/2 -43514 7/2
2294.368	5	43571.56	0* 7/2 -43571 5/2
2293.379	5	43590.35	0* 7/2 -43590 7/2 8A1
2274.186	4	43958.20	0* 7/2 -43958 5/2
2273.004	3	43981.05	0* 7/2 -43981 7/2
2261.424	3	44206.24	0* 7/2 -44206 7/2
2259.758	2	44238.83	0* 7/2 -44238 9/2
2259.528	3	44243.33	0* 7/2 -44243 5/2
2258.412	3	44265.20	0* 7/2 -44265 7/2
2255.474	3	44322.85	0* 7/2 -44323 7/2
2252.533	2	44380.71	0* 7/2 -44380 9/2
2245.545	3	44518.81	0* 7/2 -44518 5/2
2245.013	1	44529.36	0* 7/2 -44529 7/2
2242.335	3	44582.54	0* 7/2 -44582 9/2
2236.946	3	44689.93	0* 7/2 -44689 9/2
2233.944	3	44749.98	0* 7/2 -44750 7/2
2226.918	3	44891.15	0* 7/2 -44891 7/2
2225.524	3	44919.27	0* 7/2 -44919 9/2
2220.630	3	45018.26	0* 7/2 -45018 7/2
2217.048	2	45090.98	0* 7/2 -45090 9/2

LONG. ONDE (A)	1	NOMB. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION
2215.046	3	45131.73	0* 7/2 -45131 7/2
2214.168	2	45149.63	0* 7/2 -45149 7/2
2205.777	2	45321.36	
2205.590	2	45325.20	
2203.975	1	45358.41	
2195.934	2	45524.49	
2194.632	1	45551.49	
2194.107	3	45562.39	
2193.767	2	45569.45	
2193.595	1	45573.03	
2192.538	1	45594.99	

LISTE 7 DEUXIEME PARTIE

LONG. ONDE VIDE (A)	1	NOMB. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION
2191.251	1	45636.03	
2189.512	2	45672.28	
2189.170	4	45679.41	
2189.018	3	45682.58	
2186.898	2	45726.86	
2186.367	2	45737.98	
2184.910	1	45768.47	
2181.676	2	45836.31	
2181.484	3	45840.35	
2178.755	4	45897.77	
2178.253	1	45908.35	0* 7/2 -45908 5/2, 7/2
2178.135	2	45910.83	
2175.139	2	45974.06	
2173.024	2	46018.83	
2167.961	2	46126.28	
2165.768	1	46173.00	
2165.609	3	46176.39	
2162.700	2	46238.51	0* 7/2 -46238 9/2
2162.457	3	46243.68	
2161.084	2	46273.06	
2159.696	1	46302.81	
2159.192	2	46313.61	
2152.932	1	46448.28	
2150.760	1	46495.18	
2150.533	2	46500.09	0* 7/2 -46500 7/2
2149.440	2	46523.74	
2147.252	5	46571.16	
2145.646	1	46606.01	
2144.349	2	46634.20	
2143.653	3	46649.35	

LONG. ONOI VICE (A)	I	NOMB. ONOES (CM-1)	CLASSIFICATION
2143.377	2	46655.34	
2142.924	3	46665.20	
2138.542	1	46760.83	
2136.428	2	46807.10	
2135.478	3	46827.92	
2135.305	2	46831.71	
2134.596	3	46847.26	
2133.612	2	46868.88	
2132.111	1	46901.87	
2131.952	3	46905.37	
2130.887	1	46928.80	
2129.171	4	46966.64	
2128.674	5	46977.61	
2127.501	2	47013.50	
2126.089	2	47034.72	
2125.316	3	47051.82	
2123.447	3	47093.24	
2121.914	3	47127.25	
2121.210	2	47142.91	
2120.173	3	47165.97	
2120.001	3	47169.79	
2119.352	2	47184.24	
2118.132	3	47211.41	
2115.674	2	47266.26	
2112.178	3	47344.50	
2107.418	2	47451.42	
2106.582	2	47470.26	
2102.670	2	47558.58	
2101.939	1	47575.12	
2101.252	2L	47590.67	
2099.555	4	47629.13	
2099.104	2	47639.37	
2098.128	3	47661.54	
2097.733	4	47670.51	
2097.342	2	47679.38	
2096.951	2	47688.29	
2096.690	3	47694.22	
2094.653	1	47740.60	
2092.879	2	47781.07	
2092.484	1	47790.08	
2091.065	1	47822.53	
2090.778	4	47829.08	
2090.425	3	47837.16	
2090.281	2	47840.46	
2088.725	2	47876.08	

LONGITUDE VIDE (A)	I	NOMBR. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION
2087.294	2	47908.87	
2086.724	3	47922.00	
2085.883	3	47941.32	
2085.631	2	47947.11	
2083.458	3	47997.12	
2081.225	3	48047.94	
2080.530	3	48064.67	
2080.106	1L	48074.46	
2078.687	2	48107.30	
2078.320	2	48115.79	
2077.800	3L	48127.82	
2077.500	1	48134.78	
2075.270	3	48186.51	
2074.826	2	48196.80	
2073.467	1	48228.39	
2072.940	1	48240.67	
2068.997	1	48332.58	
2068.874	1	48335.46	
2067.716	1	48362.53	
2067.501	1	48367.56	
2067.327	1	48371.64	
2066.835	1	48383.15	
2066.481	2	48391.45	
2065.663	4	48410.60	
2065.352	2	48417.90	
2065.095	2	48423.91	
2063.457	1	48462.37	
2062.630	1	48481.80	
2062.427	2	48486.56	
2061.756	2	48502.35	
2061.653	3	48504.76	
2059.820	4L	48547.92	
2058.640	3	48575.76	
2057.069	2	48612.85	
2055.980	1	48638.60	
2054.582	2L	48671.69	
2052.939	1	48710.64	
2052.459	1	48722.05	
2051.996	4	48733.04	
2051.561	3	48743.37	
2051.421	2	48746.70	
2051.011	3	48756.44	
2050.814	2	48761.12	
2050.645	2	48765.14	
2050.533	3	48767.81	

LONG. ONDE VIDE (A)	I	NOMB. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION
2050.061	3L	48779.03	
2048.929	2	48805.99	
2046.514	3	48863.58	
2045.109	2	48897.15	
2045.036	2	48898.90	
2043.719	4	48930.39	
2042.612	3	48956.91	
2042.452	2	48960.76	
2041.946	2	48972.89	
2040.549	3	49006.41	
2040.142	2	49016.19	
2039.501	2	49031.61	
2037.525	4	49079.15	
2036.662	2	49099.95	
2035.857	2	49119.37	
2035.368	1	49131.17	
2035.236	2	49134.35	
2033.609	2	49173.65	
2033.510	3L	49176.06	
2032.667	2	49196.44	
2032.261	2	49206.27	
2031.340	2	49228.59	
2029.965	3	49261.92	
2029.199	2	49280.52	
2028.659	1	49293.65	
2027.277	1	49327.24	
2027.089	3	49331.82	
2026.680	1	49341.77	
2026.472	3	49346.83	
2026.005	1	49358.21	
2025.141	1	49379.28	
2025.045	1	49381.61	
2024.405	1	49397.23	
2024.230	2	49401.49	
2023.863	2	49410.45	
2022.210	1	49450.84	
2021.896	1	49458.53	0* 7/2 -17A1
2021.826	2	49460.24	0* 7/2 -17A1
2021.438	2	49469.73	0* 7/2 -17A1
2020.898	1	49482.95	
2020.453	1	49491.64	
2020.144	1	49501.41	
2019.776	1	49510.45	
2019.040	2	49528.49	
2018.509	2L	49541.51	
2017.752	1	49560.10	0* 7/2 -18A1

LONG.ONDE VIDE (A)	I	NOMB.ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION
2017.653	2	49562.54	0* 7/2 -18A1
2017.545	1	49565.19	0* 7/2 -18A1
2017.054	1	49577.25	
2016.798	1	49583.55	
2016.234	1	49597.42	
2016.081	1	49601.17	
2015.887	2	49605.94	
2015.038	2L	49626.86	0* 7/2 -19A1
2014.931	3	49629.49	0* 7/2 -19A1
2014.518	1	49639.65	
2014.281	1	49645.49	
2013.993	2L	49652.60	
2013.803	2	49657.28	
2013.451	1	49665.96	
2013.185	1	49672.52	
2012.671	2	49685.22	0* 7/2 -20A1
2012.574	1	49687.61	0* 7/2 -20A1
2012.405	1	49691.78	
2012.247	2	49695.68	
2012.025	1	49701.16	
2011.908	2	49704.07	
2011.794	1	49706.87	
2011.604	2	49711.56	
2011.463	1	49715.06	
2011.209	1	49721.34	0* 7/2 -30B1
2011.055	1	49725.13	
2010.810	1L	49731.20	0* 7/2 -31B1
2010.636	1L	49735.52	0* 7/2 -21A1
2010.381	1	49741.82	0* 7/2 -32B1
2009.993	1	49751.42	0* 7/2 -33B1
2009.688	1	49758.97	0* 7/2 -34B1
2009.355	1	49767.21	0* 7/2 -35B1
2009.106	1	49773.39	0* 7/2 -36B1
2008.895	1L	49778.61	0* 7/2 -22A1,37B1
2008.627	1L	49785.26	0* 7/2 -38B1
2008.377	1	49791.45	0* 7/2 -39B1
2008.191	1	49796.05	0* 7/2 -40B1
2008.024	1	49800.21	0* 7/2 -41B1
2007.851	1	49804.50	0* 7/2 -42B1
2007.707	D	49808.05	0* 7/2 -43B1
2007.562	D	49811.66	0* 7/2 -44B1
2007.479	D	49813.72	0* 7/2 -23A1
2006.623	1	49834.98	0* 7/2 -24A2
2006.323	1	49842.42	0* 7/2 -24A1
2005.532	L	49862.08	0* 7/2 -25A2

LONG. ONDE VIDE (A)	I	NOMB. ONDES (CM-1)	CLASSIFICATION
2005.293	I	49868.01	0* 7/2 -25A1
2004.624	L	49884.66	0* 7/2 -26A2
2004.412	I	49889.94	0* 7/2 -26A1
2003.651	I	49908.90	0* 7/2 -27A1
2003.180	L	49920.61	0* 7/2 -27A2
2002.956	I	49926.21	0* 7/2 -28A1
2002.553	L	49936.27	0* 7/2 -28A2
2002.351	I	49941.28	0* 7/2 -29A1
2002.020	L	49949.54	0* 7/2 -29A2
2001.830	I	49954.28	0* 7/2 -30A1
2001.531	L	49961.74	0* 7/2 -30A2
2001.359	I	49966.04	0* 7/2 -31A1
2001.129	L	49971.78	0* 7/2 -31A2
2000.944	I	49976.41	0* 7/2 -32A1
2000.784	L	49980.40	0* 7/2 -32A2
2000.575	I	49985.63	0* 7/2 -33A1
2000.472	L	49988.19	0* 7/2 -33A2
2000.238	I	49994.04	0* 7/2 -34A1
1999.889	I	50002.77	0* 7/2 -35A1
1999.612	I	50009.71	0* 7/2 -36A1
1999.354	I	50016.15	0* 7/2 -37A1
1999.125	I	50021.87	0* 7/2 -38A1
1998.904	I	50027.42	0* 7/2 -39A1
1998.717	I	50032.10	0* 7/2 -40A1
1998.539	I	50036.54	0* 7/2 -41A1
1998.373	I	50040.71	0* 7/2 -42A1
1998.211	I	50044.77	0* 7/2 -43A1
1998.067	I	50048.38	0* 7/2 -44A1
1997.918	I	50052.09	0* 7/2 -45A1
1997.816	10	50054.66	0* 7/2 -46A1
1997.697	10	50057.64	0* 7/2 -47A1
1997.585	10	50060.45	0* 7/2 -48A1

Or, quand n augmente, l'interaction $Q(f6s)$, bien qu'indépendante de np , brise progressivement le couplage LS des électrons $6snp$ car $Q(6snp)$ et $Q(fnp)$ tendent simultanément vers zéro. A la limite, les 24 niveaux d'une configuration $f^{13}snp$ conduisent aux quatre niveaux des états $1, 3$ de la configuration fondamentale $f^{13}s$ de Tm II. En raison de la faible température du four et de la grande séparation du doublet ${}^2F(8771\text{ cm}^{-1})$, nous pensons que seules les transitions partant du fondamental ${}^2F_{7/2}$, sont observées. Au total, 10 transitions seront permises à chaque terme ($f^{13} [{}^2F_{7/2}], 6snp$). Afin de faciliter l'identification des raies qui correspondent aux termes n de la série ($f^{13} [{}^2F_{7/2}] 6s np$), nous avons calculé empiriquement la structure des niveaux d'énergie pour plusieurs jeux de paramètres. Pour la décroissance des intégrales $G_1(6snp)$ et ζ_{np} en fonction de n , nous avons tenu compte des valeurs empiriques, déterminées à partir des séries $6snp$ de Yb I et $np6s^2$ de Lu I.

Les résultats sont schématiquement représentés sur la figure 24. En abscisse, la position relative des 10 niveaux de nombre quantique J compris entre $5/2$ et $7/2$, est rapportée au centre de gravité calculé de tous les niveaux construits sur le parent ${}^2F_{7/2}$ de f^{13} . Un trait, de hauteur proportionnelle au pourcentage de chaque vecteur propre sur le terme 1P_1 de $6s6p$ en couplage intermédiaire j_1j_2 , indique clairement les niveaux dont les transitions avec ${}^2F_{7/2}$ seront les plus intenses. Quand le nombre quantique n de p augmente, les niveaux se rassemblent en deux groupes, dont les limites respectives sont les niveaux 3F_4 et 3F_3 de $f^{13}s$.

Dans la phase intermédiaire, $Q(fnp)$ très faible et ζ_{np} plus grand que $G_1(snp)$, chaque groupe composé de cinq niveaux a une structure qui se rapproche de celle du couplage J_1j_2 défini par $((f^{13}s)[{}^3F] J_1, np j_2)$. Les termes ($f^{13} [{}^2F_{7/2}], (6snp) {}^1P_1$), pour n égal à 7 et 8, ont été identifiés. En effet le couplage réel est encore assez proche du couplage j_1j_2 et les transitions des niveaux $J = 5/2, 7/2, 9/2$ de ($f^{13} [{}^2F_{7/2}], (6snp) {}^1P_1$) sont suffisamment intenses pour être reconnues avec certitude dans le spectre d'absorption. Entre les valeurs 8 et 18 de np ,

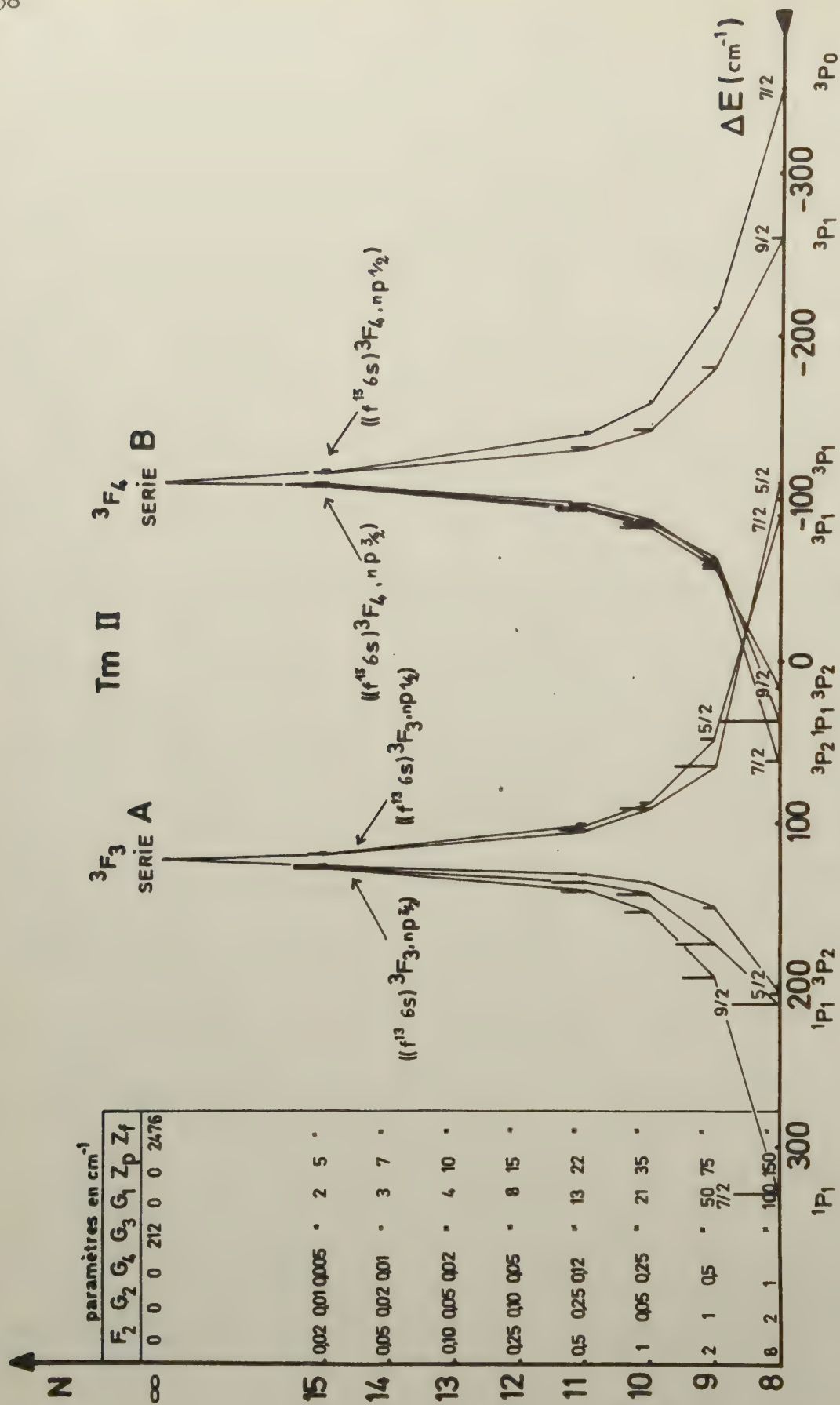


fig. 24

aucun terme n'a pu être choisi sans ambiguïté tant la densité des raies observées est grande et l'intensité des transitions quasiment uniforme. La photographie 3 (page 193) montre la portion du spectre d'absorption où sont attendues les transitions de $f^{13}6s9p$ d'après la variation du défaut quantique μ_n (np). Aucune raie de ce domaine n'est assez intense pour guider notre choix.

Pour $n > 17$, le couplage devient nettement $((f^{13}s)[^3F] J_1, np j_2)$ et les niveaux, conduisant à la limite 3F_3 de $f^{13}s$, ont été identifiés. Cette série, désignée par A, se compose de deux groupes A_1 et A_2 de trois et deux transitions aux intensités très différentes comme le montre la figure 24. Les trois transitions fortes qui correspondent au terme $((f^{13}s) ^3F_3, np 3/2)$ sont de moins en moins résolues au fur et à mesure que n augmente, et c'est approximativement la position de leur centre de gravité que nous avons mesuré.

Une structure analogue est observée pour les termes $((f^{13}s) ^3F_4, np 3/2)$ de la série B qui converge vers le niveau fondamental 3F_4 de Tm II. La photographie 4 (page 193) montre les deux séries B et A qui ont pour limite les deux niveaux 3F_4 et 3F_3 distant de $236,94 \text{ cm}^{-1}$.

Les transitions non résolues des termes A_1 sont repérées de 19 à 40 et mesurées jusqu'à 48 sur la plaque photographique 4. Entre les termes $22A_1$ et $23A_1$ apparaissent les transitions de la série B_1 . A droite des termes de la série A_1 ($n > 26$), les raies très larges de la série A_2 , faibles en intensité, présentent le profil dissymétrique (intensité plus faible vers les courtes longueurs d'onde) des raies autoionisées observé par H. BEUTLER [79] et U. FANO [80] [81].

Les tables 20 et 21 donnent les longueurs d'onde mesurées et les énergies des termes de ces séries.

TABLE 20

Tm I : Série A $4f^{13}6s^2\ ^2F_{7/2} (4f^{13}6s)[^3F]3,(np)j_2)$					
Limite $^3F_3 : 50116,7\text{ cm}^{-1}$					
Série A ₁ $((f^{13}s)[^3F]3,(np)3/2)$					
n	$\lambda\text{ (Å)}$		$E_n(\text{obs})(\text{cm}^{-1})$		n*
17	2021,438	2021,826	2021,896	CG 49462,97	12,9562
18	2017,545	2017,653	2017,752	CG 49562,81	14,075
19	2014,931	2015,038		CG 49627,73	14,981
20	2012,574	2012,671		CG 49686,01	15,962
21		2010,636		49735,52	16,967
22		2008,895		49778,61	18,016
23		2007,479		49813,72	19,031
24		2006,323		49842,42	20,002
25		2005,293		49868,01	21,006
26		2004,412		49889,94	21,999
27		2003,651		49908,90	22,980
28		2002,956		49926,21	24,002
29		2002,351		49941,28	25,011
30		2001,830		49954,28	25,993
31		2001,359		49966,04	26,99
32		2000,944		49976,41	27,97
33		2000,575		49985,63	28,94
34		2000,238		49994,04	29,91
35		1999,889		50002,77	31,03
36		1999,612		50009,71	32,03
37		1999,354		50016,15	33,04
38		1999,125		50021,87	34,02
39		1998,904		50027,42	35,06

TABLE 20 (suite)

40	1998,717	50032,10	36,02
41	1998,539	50036,54	37,00
42	1998,373	50040,71	38,00
43	1998,211	50044,77	39,06
44	1998,067	50048,38	40,08
45	1997,918	50052,09	41,21
46	1997,816	50054,66	42,06
47	1997,697	50057,64	43,10
48	1997,585	50060,45	44,17

Série A_2 ((f¹³_s) [³F] 3 , (np) 1 /2)

n	λ (Å)	E_n (obs) (cm ⁻¹)	n*
24	2006,622	49834,98	19,736
25	2005,532	49862,08	20,760
26	2004,624	49884,66	21,747
27	2003,180	49920,62	23,657
28	2002,553	49936,27	24,662
29	2002,020	49949,54	25,623
30	2001,531	49961,75	26,61
31	2001,129	49971,78	27,52
32	2000,784	49980,40	28,37
33	2000,472	49988,19	29,22

TABLE 21

Tm I : Série B ₁ 4f ¹³ 6s ² ² F _{7/2} 4f ¹³ 6s) [³ F]4, (np)3/2)			
Limite ³ F ₄ : 49879,76 cm ⁻¹			
n	λ (Å)	E _n (obs) (cm ⁻¹)	n*
30	2011,209	49721,33	26,32
31	2010,810	49731,20	27,18
32	2010,381	49741,82	28,20
33	2009,993	49751,42	29,24
34	2009,688	49758,97	30,14
35	2009,355	49767,21	31,22
36	2009,106	49773,39	32,12
37	2008,895	49778,60	32,94
38	2008,627	49785,26	34,08
39	2008,377	49791,45	35,25
40	2008,191	49796,05	36,21
41	2008,024	49800,21	37,14
42	2007,851	49804,50	38,18
43	2007,707	49808,05	39,12
44	2007,562	49811,66	40,14

Les résultats du programme d'ajustement du défaut quantique pour les termes $n > 23$ et $n > 30$ des séries A_1 et B_1 se trouvent dans les tableaux 35 et 36. La différence en énergie des deux limites T_∞ extrapolées correspond très exactement à l'écart des deux niveaux fondamentaux 3F_4 et 3F_3 de la configuration $f^{13}s$ de Tm II.

L'incertitude sur la limite de A_1 est plus faible que sur celle de B_1 car le nombre de termes observés est plus grand. Nous adopterons donc pour limite 3F_3 de la série A la valeur : $50116,71 \pm 0,26 \text{ cm}^{-1}$. En retranchant à cette limite, l'énergie du niveau 3F_3 , soit $236,94 \text{ cm}^{-1}$, nous avons obtenu l'énergie d'ionisation de l'atome neutre de Tm : $49879,8 \pm 0,5 \text{ cm}^{-1}$.

Comme nous avons négligé les niveaux des termes $((f^{13}s) ^3F_{3,np} \frac{1}{2})$ pour extrapoler la limite de la série A l'incertitude ΔT_∞ a été fixée au double de la valeur calculée à partir des termes de A_1 .

Malgré l'incertitude plus grande sur la limite, la précision est toujours limitée par la détermination du facteur de conversion $8065,73 \pm 0,23 \text{ cm}^{-1}/\text{eV}$.

Le potentiel d'ionisation de Tm I est donc de :

$$6,1842 \pm 0,0002 \text{ Volt.}$$

Cette nouvelle valeur est comparée à celles obtenues par ionisation de surface :

Référence	[68]	[76]	[69]
Potentiel d'ionisation (Volt)	$5,87 \pm 0,10$	$6,15 \pm 0,03$	$6,03 \pm 0,04$

Elle est aussi en bon accord avec la valeur semi-empirique de $6,18 \pm 0,02 \text{ V}$ déterminée par J. READER et J. SUGAR [78] .

Les valeurs de μ_n pour les termes 7 et 8 de ($f^{13}[^2F_{7/2}] 6sns$) et, 5 et 6 de ($f^{13}[^2F_{7/2}] 6snd$) sont comparées dans le tableau 37 aux défauts quantiques de np. Ils sont du même ordre de grandeur que ceux obtenus pour les séries monélectroniques nl de Lu I et deviennent petits quand l augmente.

TABLEAU 37 - Variation du défaut quantique μ en fonction de l

($f^{13}[^2F] 7/2, 6sns$)		($f^{13}[^2F] 7/2, 6snp$)		($f^{13}[^2F] 7/2, nd6s$)	
$n = 7$	4,4775	$n = 23$		$n = 5$	2,936
		à	3,98		
$n = 8$	4,445	48		$n = 6$	2,785

Les configurations excitées $f^{12}5d6s ns$ et $f^{12}nd6s^2$ qui possèdent un très grand nombre de niveaux possibles, sont probablement responsables de la forte densité des raies qui demeurent sans interprétation. Ces configurations n'ont pas pu être identifiées car toutes les raies en absorption partent du niveau fondamental $^2F_{7/2}$ et les niveaux très élevés (énergie supérieure à 45000 cm^{-1}), ainsi créés, ont un J compris entre $5/2$ et $9/2$ sans qu'il soit possible de déterminer cette valeur en dehors de toute ambiguïté. Pour les niveaux moyennement élevés qui appartiennent en majorité à la configuration $f^{13}dp$, les valeurs de J ont pu être déterminées en observant les transitions en émission soit avec $f^{13}s^2 ^2F_{5/2}$, soit avec les niveaux de $f^{13}ds$.

Conclusion

Grâce à l'utilisation de la technique du four à induction développée par F.S. TOMKINS à Argonne National Laboratory, nous avons pu observer les spectres d'absorption de Yb, Lu et Tm dans des conditions excellentes.

L'interprétation des spectres nous a permis de mettre en évidence, pour la première fois, les séries de Rydberg de ces éléments. En partant des termes élevés qui sont les moins perturbés et à l'aide d'un programme d'ajustement du défaut quantique, les limites des séries ont été déterminées avec une précision supérieure à 10^{-5} . De ces limites, nous avons déduit les énergies d'ionisation des atomes neutres de Yb, Lu et Tm, puis comparé celles-ci aux valeurs obtenues par la méthode d'ionisation de surface : la précision obtenue est environ 1000 fois meilleure. A l'avenir, il serait nécessaire de stimuler des études d'effet Zeeman ou de structures hyperfines en absorption pour résoudre les difficultés rencontrées dans la détermination des valeurs J des niveaux élevés; niveaux qui sont créés, pour la plupart, à l'aide d'une seule transition observée en absorption.

A N N E X E

- * - * - * - * - *

Interaction électrostatique $Q(fp)$ de la configuration f^{12}_{dps} Antisymétrie

$$\langle f^{12}_{dps} | Q(fp) | f^{12}_{dps} \rangle = 12 \sum_{\bar{\Psi}} \langle f'' \bar{S} \bar{L}, f \rangle \langle f'' \bar{S} \bar{L}, f \rangle \times$$

$$\left[\langle (f''_{1...11}, f_{12}) d_{13} p_{14} s_{15} | C_{12}^{(K)} C_{14}^{(K)} | (f''_{1...11}, f_{12}) d_{13} p_{14} s_{15} \rangle - \langle (f''_{1...11}, f_{12}) d_{13} p_{14} s_{15} | C_{12}^{(K)} C_{14}^{(K)} | \right. \\ \left. (f''_{1...11}, f_{14}) d_{13} p_{12} s_{15} \rangle \right] \quad \downarrow A$$

Formule Fano, Prats, Goldschmidt

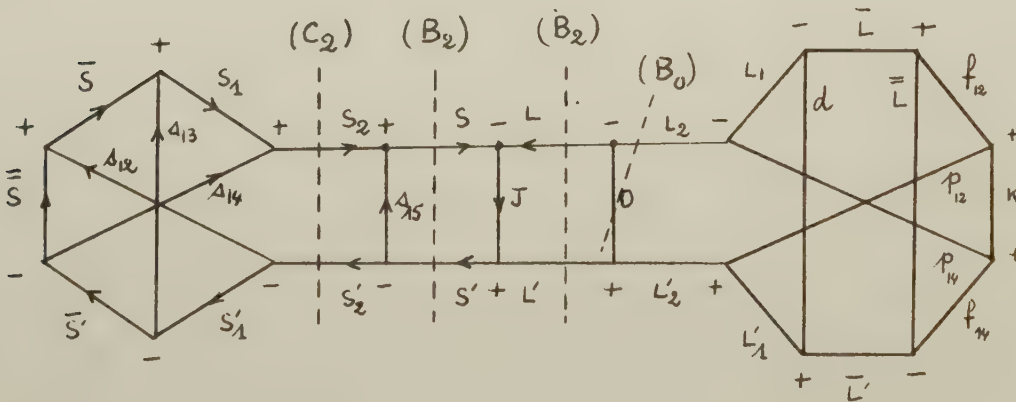
$$A = [f, f]^{-1/2} \langle f || C^K || p \rangle \times$$

$$\langle p || C^K || f \rangle = \langle (((\bar{S} s_{12}) \bar{S} s_{13}) s_1 s_{14}) s_2 s_{15}) S, (((\bar{L}, (p_{12} k) f_{12}) \bar{L}, d_{13}) L_1 p_{14}) L_2 0) L | \quad (J) \\ (((\bar{S} s_{14}) \bar{S}' s_{13}) s'_1 s_{12}) s'_2 s_{15}) S', (((\bar{L}, (k p_{14}) f_{14}) \bar{L}', d_{13}) L'_1 p_{12}) L'_2 0) L' \rangle$$

Coefficient de recouplage

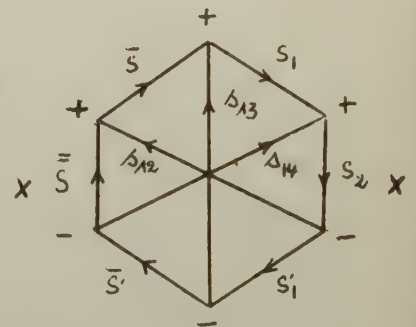
$$\langle | \rangle^{(J)} = (-1)^{2[J + \bar{S} + \bar{S}' + s_1 + s_2 + s + \bar{S}]} \times$$

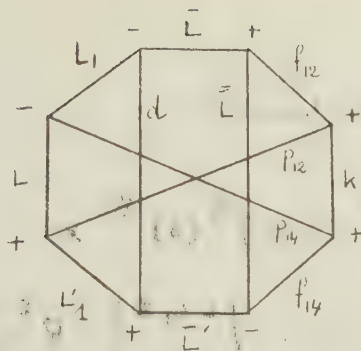
$$[\bar{S}, s_1, s_2, S, 3, \bar{L}, L_1, L_2, L, \bar{S}', s'_1, s'_2, S', 3, \bar{L}', L'_1, L'_2, L']^{1/2} \times$$



Réduction du graphique (suivant les règles de coupure de la page 25).

$$\underbrace{\delta(s_2 s'_2) [s_2]^{-1}}_{C_2} \underbrace{\delta(s s') [s]^{-1}}_{B_2} \underbrace{\delta(l l') [l]^{-1}}_{B_2} \underbrace{\delta(l l_2) \delta(l' l'_2) [l_2]^{-1}}_{B_0} \times$$





Formule finale

$$(1) \quad 63 \delta(S_2 S'_2) (-1)^{\bar{S} + \bar{S}' + S_1 + S'_1 + L} [S_1, S'_1, L_1, L'_1]^{1/2} \begin{pmatrix} 3 & k & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{L}} \langle f^2 f f f^3 \rangle$$

$$\langle f^2 f f f^3 \rangle [\bar{S}, \bar{L}]^{-1} \left\{ \begin{matrix} \bar{S} & S_1 & 1/2 \\ \bar{S} & 1/2 & \bar{S}' \\ 1/2 & S_2 & S'_1 \end{matrix} \right\} \sum_x (-1)^x [x]^{-1} \left\{ \begin{matrix} \bar{L} & \bar{L}' & x \\ 3 & 3 & \bar{L} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 3 & 3 & x \\ 1 & 1 & k \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & x \\ L_1 & L'_1 & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 & L_1 & x \\ \bar{L} & \bar{L} & 2 \end{matrix} \right\} G^{(\kappa)}(fp)$$

FORMULES DES COEFFICIENTS ANGULAIRES DES INTEGRALES R^k

Interaction $f^{n_{sp}} - f^{n-1}_{ds^2}$

$$(2) \quad \delta(SS_1) \sqrt{n} (-1)^{2J + S_1 + S_2 + L + 1/2} [S_2, L_1]^{1/2} [S]^{-1/2} \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{L}} (f^{n-1} \bar{S} \bar{L} f^n S_1 L_1) \left\{ \begin{matrix} L & L_1 & 1 \\ 3 & 2 & \bar{L} \end{matrix} \right\} R^1(ds, fp)$$

$$(3) \quad \delta(L_1 L_2) \frac{3\sqrt{n}}{7} (-1)^{2S_2 + S_1 + L + 1/2} [S_1, L_1]^{1/2} [S_2]^{-1/2} \sum_{\bar{S}, \bar{L}} \delta(\bar{S} S_2) (-1)^{\bar{S} + \bar{L}} (f^{n-1} \bar{S} \bar{L} f^n S_1 L_1) \left\{ \begin{matrix} L & L_1 & 1 \\ 3 & 2 & \bar{L} \end{matrix} \right\} R^3(ds, pf)$$

Pour n égal à 13, ces formules se réduisent à :

$$(4) \quad \delta(S 1/2) \frac{1}{\sqrt{2}} (-1)^{S_2 + L + \bar{L}} [S_2, \bar{S}, \bar{L}]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} L & 3 & 1 \\ 3 & 2 & \bar{L} \end{matrix} \right\} R^1(ds, fp)$$

$$(5) \quad \delta(S_2 \bar{S}) \frac{3\sqrt{2}}{7} (-1)^{L+1} [\bar{L}]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} L & 3 & 1 \\ 3 & 2 & \bar{L} \end{matrix} \right\} R^3(ds, pf)$$

Interaction $f_{ds}^n - f_{sp}^{n-1} s^2$

$$\begin{aligned}
 (6) \quad & \delta(SS_1) \delta(LL_2) \frac{3\sqrt{n}}{5} (-1)^{2J+S_1+S_2+L+1/2} [S_2, L_1]^{1/2} [S]^{-1/2} \times \\
 & \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{L}} (f^{n-1} \bar{S} \bar{L} \parallel f^n S_1 L_1) \left\{ \begin{matrix} L & L_1 & 2 \\ 3 & 1 & \bar{L} \end{matrix} \right\} R^2(ps, fd) \\
 (7) \quad & \delta(LL_2) \frac{3\sqrt{n}}{7} (-1)^{2J+3S_2+S_1+L+3/2} [S_2, S_1, L_1]^{1/2} \times \\
 & \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{L}} (f^{n-1} \bar{S} \bar{L} \parallel f^n S_1 L_1) \left\{ \begin{matrix} \bar{S} & S_1 & 1/2 \\ S_2 & S & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & L_1 & 2 \\ 3 & 1 & \bar{L} \end{matrix} \right\} R^3(ps, df)
 \end{aligned}$$

Pour n égal à 13, ces formules se réduisent à :

$$\begin{aligned}
 (8) \quad & \delta(S_{1/2}) \frac{3}{5\sqrt{2}} (-1)^{S_2+L+\bar{L}} [S_2, \bar{S}, \bar{L}]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} L & 3 & 2 \\ 3 & 1 & \bar{L} \end{matrix} \right\} R^2(ps, fd) \\
 (9) \quad & \delta(SS') \delta(LL') \frac{3\sqrt{2}}{7} (-1)^{S_2+L+\bar{L}+1} [S_2, \bar{S}, \bar{L}]^{1/2} \left\{ \begin{matrix} \bar{S} & 1/2 & 1/2 \\ S_2 & S & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & 3 & 2 \\ 3 & 1 & \bar{L} \end{matrix} \right\} R^3(ps, df)
 \end{aligned}$$

Interactions $f^{12}(d+s)^2 + f^{13}_p$

$$\langle (f^{12})_{SL, s^2} | Q | ((f^{12})_{S'_1 L'_1, d})_{S'_2 L, s} \rangle_{SL}$$

$$(10) \quad 24 \delta(SS'_1) (-1)^{S'_2+S+L+3/2} [S'_2]^{1/2} [S, L]^{-1/2} [S]^{-1} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{L}} [\bar{S}, \bar{L}]^1 \times$$

$$\langle f^2_{SL}, f \parallel f^3 \bar{S} \bar{L} \rangle \langle f^2_{S'_1 L'_1}, f \parallel f^3 \bar{S} \bar{L} \rangle \left\{ \begin{matrix} 3 & \bar{L} & L \\ L'_1 & 2 & 3 \end{matrix} \right\} R^2(fs, fd)$$

$$(11) \quad 3\sqrt{35} (-1)^{S'_1+S'_2+L+1/2} [S'_2]^{1/2} [S, L]^{-1/2} \begin{pmatrix} 3 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{L}} [\bar{S}, \bar{L}]^1 \times$$

$$\langle f^2_{SL}, f \parallel f^3 \bar{S} \bar{L} \rangle \langle f^2_{S'_1 L'_1}, f \parallel f^3 \bar{S} \bar{L} \rangle \left\{ \begin{matrix} S & 1/2 & \bar{S} \\ S'_1 & 1/2 & S'_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 3 & \bar{L} & L \\ L'_1 & 2 & 3 \end{matrix} \right\} R^3(fs, df)$$

$$\langle ((f^{12})_{S_L, S^z} | Q | ((f^{12})_{S'_1 L'_1, (d^2)_{S'_2 L'_2}})_{S_L} \rangle$$

$$(12) \quad \sqrt{2} \delta(S S'_1) \delta(L L'_1) (-1)^{L_1} [S, L]^{-1/2} [S'_2, L'_2]^{1/2} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 R^2(d^2, d^2)$$

$$\langle (((f^{12})_{S_1 L_1, d})_{S_2 L, d})_{S_L} | Q | ((f^{12})_{S'_1 L'_1, (d^2)_{S'_2 L'_2}})_{S_L} \rangle$$

$$(13) \quad \sqrt{10} \delta(S_1 S'_1) \delta(L_1 L'_1) \delta(L'_2 2) (-1)^{S'_1 + S'_2 + S + 1} [S_2, S'_2]^{1/2} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times$$

$$\left\{ \begin{matrix} S & S'_2 & S'_1 \\ 1/2 & S_2 & 1/2 \end{matrix} \right\} R^2(ds, d^2)$$

$$(14) \quad 2i\sqrt{2} \delta(S_1 S'_1) (-1)^{L_1 + S'_1 + L'_1 + L'_2 + S + L + 1} [S_2, S'_2, L'_2]^{1/2} [S'_1]^{-1} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times$$

$$\left\{ \begin{matrix} S'_2 & S'_1 & S \\ S_2 & 1/2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & L'_1 & L'_2 \\ 2 & 2 & L_1 \end{matrix} \right\} \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{L}} [\bar{S}, \bar{L}]^{-1} \langle f^2_{S_1 L_1, f} f^3_{\bar{S} \bar{L}} \rangle \langle f^2_{S'_1 L'_1, f} f^3_{\bar{S} \bar{L}} \rangle \left\{ \begin{matrix} L'_1 & 3 & \bar{L} \\ 3 & L_1 & 2 \end{matrix} \right\} R^2(fs, fd)$$

$$(15) \quad 3\sqrt{70} (-1)^{L_1 + S'_1 + L'_1 + L'_2 + L + 1} [S_2, S'_2, L'_2]^{1/2} \begin{pmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} L & L'_2 & L'_1 \\ 2 & L_1 & 2 \end{matrix} \right\} \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{S} + \bar{L} + 1/2} \times$$

$$[\bar{S}, \bar{L}]^{-1} \langle f^2_{S_1 L_1, f} f^3_{\bar{S} \bar{L}} \rangle \langle f^2_{S'_1 L'_1, f} f^3_{\bar{S} \bar{L}} \rangle \left\{ \begin{matrix} L'_1 & 3 & \bar{L} \\ 3 & L_1 & 2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S'_2 & S'_1 & S \\ 1/2 & S_2 & \bar{S} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1/2 & 1/2 & S'_2 \\ S_2 & \bar{S} & S_1 \end{matrix} \right\} R^3(fs, df)$$

$$\langle (((f^{12})_{S_1 L_1, d})_{S_2 L, d})_{S_L} | Q | ((f^{12})_{S'_1 L'_1, (d^2)_{S'_2 L'_2}})_{S_L} \rangle$$

$$(16) \quad \sqrt{10} \delta(S_1 S'_1) \delta(L_1 L'_1) \delta(L'_2 2) (-1)^{S'_1 + S'_2 + S + 1} [S_2, S'_2]^{1/2} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} S & S'_2 & S'_1 \\ 1/2 & S_2 & 1/2 \end{matrix} \right\} R^2(ds, d^2)$$

$$(17) \quad 2i\sqrt{2} \delta(S_1 S'_1) (-1)^{L_1 + S'_1 + L'_1 + L'_2 + S + L + 1} [S_2, S'_2, L'_2]^{1/2} [S'_1]^{-1} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} S'_2 & S'_1 & S \\ S_2 & 1/2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \times$$

$$\left\{ \begin{matrix} L & L'_1 & L'_2 \\ 2 & 2 & L_1 \end{matrix} \right\} \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{L}} [\bar{S}, \bar{L}]^{-1} \langle f^2_{S_1 L_1, f} f^3_{\bar{S} \bar{L}} \rangle \langle f^2_{S'_1 L'_1, f} f^3_{\bar{S} \bar{L}} \rangle \left\{ \begin{matrix} L'_1 & 3 & \bar{L} \\ 3 & L_1 & 2 \end{matrix} \right\} R^2(fs, fd)$$

$$(18) \quad 3\sqrt{70} \quad (-1)^{L_1+S_1'+L_1'+L_2'+L+1} [S_2, S_2', L_2']^{1/2} \begin{pmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} L & L_2' & L_1' \\ 2 & L_1 & 2 \end{matrix} \right\} \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{S}+\bar{L}+1/2} x$$

$$[\bar{S}, \bar{L}]^1 \langle f_{S_1 L_1}^2, f \rangle \langle f_{S_1' L_1'}^3 \bar{S} \bar{L} \rangle \langle f_{S_1' L_1'}^2, f \rangle \langle f_{S_1' L_1'}^3 \bar{S} \bar{L} \rangle \left\{ \begin{matrix} L_1 & 3 & \bar{L} \\ 3 & L_1 & 2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_2' & S_1' & S \\ 1/2 & S_2 & \bar{S} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 1/2 & 1/2 & S_2' \\ S_2 & \bar{S} & S_1 \end{matrix} \right\} R^3(f_s, df)$$

$$< ((f^{12})_{S_1 L_1}, d)_{S_2 L, s} SL \mid Q \mid ((f^{13})^2 F, p)_{S L} >$$

$$(19) \quad \sqrt{35} \quad s(S_2 1/2) (-1)^{L_1+L+1} [S_1, L_1]^{1/2} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} 2 & L_1 & L \\ 3 & 1 & 3 \end{matrix} \right\} R^1(ds, fp)$$

$$\sqrt{30} \quad (-1)^{S_2+L_1+L+3/2} [S_2, S_1, L_1]^{1/2} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} S_2 & 1/2 & S_1 \\ 1/2 & 1/2 & S \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 2 & L_1 & L_2 \\ 3 & 1 & 3 \end{matrix} \right\} R^3(ds, pf)$$

$$< ((f^{12})_{S_1 L_1}, (d^2)_{S_2 L_2})_{S L} \mid Q \mid ((f^{13})^2 F, p)_{S L} >$$

$$(20) \quad 10\sqrt{21} \quad (-1)^{S_1+L_1+S_2+S+L} [S_1, L_1, S_2, L_2]^{1/2} \begin{pmatrix} 2 & k & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & k & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} S & S_2 & S_1 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{matrix} \right\} x$$

$$\left\{ \begin{matrix} L_2 & L_1 & L \\ 3 & 1 & 3 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 2 & 2 & L_2 \\ 1 & 3 & k \end{matrix} \right\} R^k(fp, d^2)$$

Interactions $f^{12}(d+s)p$

$$< (((f^{12})_{S_1 L_1}, p)_{S_2 L, s})_{S L} \mid Q \mid (((f^{12})_{S_1' L_1'}, d)_{S_2' L_2', p})_{S L} >$$

$$(21) \quad 24 \quad s(S_1 S_1') s(L_1 L_1') (-1)^{S_2+S_2'+L_1} [S_2, S_2']^{1/2} [L_1]^{-1/2} [S_1]^{-1} \begin{pmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} x$$

$$\left\{ \begin{matrix} S_2 & S_1 & 1/2 \\ S_2' & S & 1/2 \end{matrix} \right\} \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{L}} [\bar{S}, \bar{L}]^1 \langle f_{S_1 L_1}^2, f \rangle \langle f_{S_1' L_1'}^3 \bar{S} \bar{L} \rangle \langle f_{S_1 L_1}^2, f \rangle \langle f_{S_1' L_1'}^3 \bar{S} \bar{L} \rangle \left\{ \begin{matrix} L_1' & \bar{L} & 3 \\ 3 & 2 & L_1 \end{matrix} \right\} R^2(f_s, fd)$$

$$(22) \quad 3\sqrt{35} \delta(L_1 L_2) (-1)^{S_2 + S'_2 + L_1 + 1} [S_2, S'_2]^{1/2} [L_1]^{-1/2} \begin{pmatrix} 3 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} S_1 & S'_2 & 1/2 \\ S & S_2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \times$$

$$\sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{S}} [\bar{S}, \bar{L}]^{-1} \left\{ \begin{matrix} S_1 & L_1 & f \\ S'_1 & L'_1 & f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_2 & L_2 & f \\ S'_2 & L'_2 & f \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S & S'_1 & 1/2 \\ S_2 & S_1 & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} 3 & 2 & 3 \\ L_1 & L_2 & L \end{matrix} \right\} R^3(fs, df)$$

$$(23) \quad \sqrt{15} \delta(S_1 S'_1) \delta(L_1 L'_1) \delta(S_2 S'_2) (-1)^{L_1 + L + 1} [L_2]^{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ L'_2 & L_1 & L \end{matrix} \right\} R^{1,2}(ps, dp)$$

$$(24) \quad 3 \delta(S_1 S'_1) \delta(L_1 L'_1) (-1)^{S_2 + S'_2 + L_1 + L} [S_2, S'_2, L_2]^{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} S_1 & S'_2 & 1/2 \\ S & S_2 & 1/2 \end{matrix} \right\} \times$$

$$\left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ L'_2 & L_1 & L \end{matrix} \right\} R^2(ps, pd)$$

Formule de l'interaction $\Lambda(f)$ de f^{12}_{dsp}

$$(25) \quad 9\sqrt{14} (-1)^{S_1 + S'_1 + L_1 + L'_1 + S_2 + S'_2 + L + L'} [S_1, S'_1, S_2, S'_2, L_1, L'_1, S, S', L, L']^{1/2} \left\{ \begin{matrix} S_2 & 1 & S'_2 \\ S'_1 & 1/2 & S_1 \end{matrix} \right\}$$

$$\left\{ \begin{matrix} S' & L' & J \\ L & S & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S & 1 & S' \\ S'_2 & 1/2 & S_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S_1 & 1 & S'_1 \\ \bar{S}' & 1/2 & \bar{S} \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & 1 & L' \\ L'_1 & 1 & L_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L_1 & 1 & L'_1 \\ \bar{L}' & 2 & \bar{L} \end{matrix} \right\} \sum_{\bar{S}, \bar{L}} (-1)^{\bar{S}, \bar{L} + J} \left\{ \begin{matrix} p^2 & f & p^3 \\ p^2 & f & p^3 \end{matrix} \right\}$$

$$[\bar{S}, \bar{L}]^{-1} \left\{ \begin{matrix} \bar{S} & 1 & \bar{S}' \\ 1/2 & \bar{S} & 1/2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \bar{L} & 1 & \bar{L}' \\ 3 & \bar{L} & 3 \end{matrix} \right\} \sum f$$

Formules angulaires des opérateurs dipolaires électriques entre

$$f^{13}_{s^2} + f^{13}_{ds} + f^{12}_{s^2p} \quad \text{et} \quad f^{12}_{ds^2} + f^{13}_{sp}$$

$$\langle (f^{13}) J, (6s^2)^1 S_0, J \parallel C^{(1)} \parallel (f^{13}) J_1, (6s6p)(S_2 L_2) J_2, J' \rangle =$$

$$(26) \quad \delta(J J_1) \delta(S_2 0) (-1)^{J+J'+1} \frac{[J']^{1/2}}{\sqrt{3}}$$

$$\langle (f^{13}) J, (6s^2)^1 S_0, J \parallel \sum_{i=1}^{13} C_i^{(1)} \parallel (f^{12}) S_1 L_1 J_1, (5d) j'_2, J' \rangle =$$

$$(27) \quad \sqrt{6} \sum_{j_2 = 5/2, 7/2} (-1)^{J_1 + J + j_2 + j'_2 + 1/2} [S_1, L_1, J_1, j'_2, J, J']^{1/2} [j_2] \begin{Bmatrix} J_1 & J' \\ j'_2 & J_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_2 & 1 & j'_2 \\ 2 & 1/2 & 3 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} S_1 & 1/2 & 1/2 \\ L_1 & 3 & 3 \\ J_1 & j_2 & J \end{Bmatrix}$$

$$\langle (f^{12}) S_1 L_1, 6p) S L J \parallel C^{(1)} \parallel ((f^{12}) S_2 L_2, 5d) S' L' J' \rangle =$$

$$(28) \quad \delta(S_1 S_2) \delta(L_1 L_2) \delta(SS') \sqrt{2} (-1)^{S+L+L'+L_1+J+1} [J, J', L, L']^{1/2} \begin{Bmatrix} J_1 & J' \\ L' & S & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ 2 & L_1 & 1 \end{Bmatrix}$$

$$\langle (((f^{13}) {}^2F, 5d) S_1 L, 6s) S L J \parallel C^{(1)} \parallel (((f^{13}) {}^2F, 6s) S_2 3, 6p) S' L' J' \rangle =$$

$$(29) \quad \delta(SS') \sqrt{2} (-1)^{S_1 + S_2 + S + L + L' + J + 1} [J, J', L, L', S_1, S_2]^{1/2} \begin{Bmatrix} J_1 & J' \\ L' & S & L \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & 1 & L' \\ 1 & 3 & 2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} 1/2 & S & S_2 \\ 1/2 & 1/2 & S_1 \end{Bmatrix}$$

B I B L I O G R A P H I E

- * - * - * - * - * - * - * - * - *

- [1] TOMKINS (F.S.) et FRED (M.)
Spectrochim. Acta, 1954, 6, 139.
- [2] TOMKINS (F.S.) et FRED (M.)
J. Opt. Soc. Amer., 1957, 47, 1087.
- [3] STEINHAUS (D.W.), ENGLEMAN (R.), BRISCOE (Jr et W.G.)
Appl. Opt., 1965, 4, 799.
- [4] HOEKSTRA (R.)
Thèse de doctorat, Amsterdam, 1969.
- [5] CONNES (P.)
Thèse de doctorat, Paris, 1955; Rev. Opt., 1959, 38, 157 et 416;
et Rev. Opt., 1960, 39, 402.
- [6] VERGES (J.)
Thèse de doctorat, Orsay, 1969 et Spectrochim. Acta, 1969, 24B, 717.
- [7] CONNES (J.), DELOUIS (H.), CONNES (P.), GUELACHVILI (G.), MAILLARD (J.P.)
et MICHEL (G.)
Nouv. Rev. d'Optique appliquée, 1970, 1, 3.
- [8] KING (A.S.)
Astrophys. J., 1941, 94, 226.

- [9] BOVEY (L.F.H.) et GARTON (W.R.S.)
Proc. Phys. Soc., 1954, 67A, 476.
- [10] MEGGERS (W.F.), CORLISS (C.H.) et SCHRIEBNER (B.F.)
Tables of Spectral Lines Intensities, National Bureau of Standards,
Monograph 32, Part I, 1961.
- [11] MOSSOTTI (V.G.) et FASSEL (V.A.)
Spectrochim. Acta, 1964, 20, 1117.
- [12] MEGGERS (W.F.) et SUGAR (J.)
Communication personnelle, 1967.
- [13] CAMUS (P.), GUELACHVILI (G.) et VERGES (J.)
Spectrochim. Acta, 1969, 24B, 373.
- [14] VETTER (R.)
Thèse de 3e cycle, Paris, 1963.
- [15] MOORE (C.E.)
Atomic Energy Levels, National Bureau of Standards, Vol I, 1949.
- [16] CONDON (E.H.) et SHORTLEY (G.H.)
The Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press,
New-York, 1935.
- [17] EL'YASHEVICH (M.A.)
Spectre des Terres Rares (en russe), Ed. de la littérature Technique
et Théorique, Moscou, 1953.

- [18] SMITH (G.)
J. Opt. Soc. Amer., 1965, 55, 937.
- [19] GERSTENKORN (S.)
Thèse de doctorat, Paris, 1962; Ann. Physique, 1962, 7.
- [20] WYART (J.F.)
Thèse de 3e cycle, Orsay, 1968.
- [21] VAN KLEEF (Th. A.M.) et KLINKENBERG (P.F.A.)
Phys. letters, à paraître, 1970.
- [22] LÖH (E.)
Phys. Rev., 1966, 147, 332.
- [23] BREWER (L.)
Communication personnelle, 1970.
- [24] RACAH (G.)
Phys. Rev., I, 1942, 61, 186.
II, 1942, 62, 438.
III, 1943, 63, 367.
- [25] JUDD (B.R.)
Operator Techniques in Atomic Spectroscopy, Mc. Graw Hill Book Co,
New-York, 1963.
- [26] FANO (U.), PRATS (F.) et GOLDSCHMIDT (Z.B.)
Phys. Rev., 1963, 129, 2643.

- [27] JUCYS (A.P.), LEVINSON (I.B.) et VANAGAS (V.V.)
Apparatus of the Theory of Angular Momentum, Israël Program for Scientific Translations, Jerusalem, 1962 (Ed. russe, Vilnius, 1960).
- [28] BORDARIER (Y.)
Thèse de doctorat, Orsay, 1970.
- [29] BORDARIER (Y.) et CARLIER (A.)
Programme de calcul des formules suivant l'algèbre de RACAH (brochure en préparation).
- [30] BORDARIER (Y.)
Programme ASSAC de regroupement des résultats d'AGENAC, (brochure en préparation).
- [31] FROESE (C.)
J. Chem. Phys., 1966, 45, 1417.
- [32] FROESE-FISCHER (C.) et WILSON (M.)
Argonne National Laboratory Report, N° ANL-7404, 1968.
- [33] WILSON (M.)
Phys. Rev., 1968, 171, 4.
- [34] BORDARIER (Y.) et DAGOURY (P.)
Programme DIAGAC de diagonalisation et de calcul des dérivées des énergies et des g , ORSAY, 1968.
- [35] BORDARIER (Y.)
Programme GRAMAC d'optimisation des paramètres par moindres carrés (brochure en préparation).

- [36] MEGGERS (W.F.)
Rev. Mod. Physics, 1942, 14, 96.
- [37] BLAISE (J.) et CAMUS (P.)
C.R. Acad. Sc., 1965, 260, 4693.
- [38] BORDARIER (Y.), VETTER (R.) et BLAISE (J.)
J. Physique, 1963, 24, 1107.
- [39] JUDD (B.R.)
Phys. Rev., 1962, 125, 613.
- [40] CAMUS (P.)
J. Physique, 1966, 27, 717.
- [41] RACAH (G.)
Proc. of The Rydberg Centennial Conference on Atomic Spectroscopy,
Lund, 1955.
- [42] NIELSON (C.W.) et KOSTER (G.F.)
Spectroscopic Coefficients for the p^n, d^n and f^n Configurations,
The Massachusetts Institute of Technology Press, Cambridge, 1963.
- [43] NIR (S.)
J. Opt. Soc. Am., 1970, 60, 354.
- [44] KOMAROVSKII (V.A.) et PENKIN (N.P.)
Opt. Spectroscop., 1969, 26, 483.
- [45] HANDRICH (E.), STEUDEL (A.), WALLENSTEIN (R.) et WALTHER (H.)
J. Physique, 1969, 30, C1-18; WALLENSTEIN (R.), Thèse, Hannover, 1970.

- [46] KLAPISCH (M.)
C.R. Acad. Sc., 1967, 265B, 914; Thèse de doctorat, Orsay, 1969.
- [47] SPECTOR (N.)
Thèse de doctorat, Université hébraïque de Jerusalem, 1962.
- [48] SPECTOR (N.)
J. Opt. Soc. Amer., 1967, 57, 312.
- [49] MEGGERS (W.F.)
J. Res. NBS, 1967, 71A, 396.
- [50] SLATER (J.C.)
Quantum Theory of Atomic Structure, Vol. II, Mc Graw-Hill Book Company, New-York, 1960.
- [51] FENEUILLE (S.) et PELLETIER-ALLARD (N.)
Physica, 1968, 40, 347.
- [52] GOLD SCHMIDT (Z.B.) et BORDARIER (Y.)
non publié. 1966.
- [53] SUGAR (J.) et READER (J.)
J. Opt. Soc. Amer., 1965, 55, 1286.
- [54] EDLEN (B.)
Handbuch der Physik, Vol. XXVII, Springer-Verlag, Berlin, 1964.
- [55] SEATON (M.J.)
Proc. Phys. Soc., 1966, 88, 815.

- [56] TOMKINS (F.S.) et ERCOLI (B.)
Appl. Optics, 1967, 6, 1299.
- [57] CLARKE (J.P.) et GARTON (W.R.S.)
J. Sci. Instrum., 1959, 36, 403.
- [58] HONIG (R.E.)
RCA Laboratories, Princeton, N.J., 1962.
- [59] TROMBE (F.), CARO (P.) et BLAISE (M.)
Rev. Hautes Tempér. et Réfract., 1965, 2, 1.
- [60] READER (J.), MEISSNER (K.W.) et ANDREW (K.L.)
J. Opt. Soc. Amer., 1960, 50, 221.
- [61] KAUFMAN (V.) et WARD (J.F.)
J. Opt. Soc. Amer., 1966, 56, 1591.
- [62] VAN VELD (R.D.) et MEISSNER (K.W.)
J. Opt. Soc. Amer., 1956, 46, 598.
- [63] KAUFMAN (V.) et ANDREW (K.L.)
J. Opt. Soc. Amer., 1962, 52, 1223.
- [64] GIACHETTI (A.)
Argonne National Laboratory Report, N° ANL-7209, 1966.
- [65] SHENSTONE (A.G.) et RUSSELL (H.N.)
Phys. Rev., 1932, 39, 415.

- [66] National Bureau of Standards (U.S.A.), Tech. News Bull., 1963, 47, 175.
- [67] DRESSER (M.J.) et HUDSON (D.E.)
Phys. Rev., 1965, 137, 673.
- [68] ZMBOV (K.F.) et MARGRAVE (J.L.)
J. Phys. Chem., 1966, 70, 3014.
- [69] HERTEL (G.R.)
J. Chem. Phys., 1968, 48, 2053.
- [70] MOORE (C.E.)
Appl. Opt., 1963, 2, 665.
- [71] CAMUS (P.) et TOMKINS (F.S.)
J. Physique, 1969, 30, 545.
- [72] BOVEY (L.F.H.) et GARTON (W.R.S.)
Proc. Phys. Soc., 1954, A67, 291.
- [73] KLINKENBERG (P.F.A.)
Physica, 1954, 21, 53.
- [74] PINNINGTON (E.H.)
Canad. J. Phys., 1963, 41, 1294.
- [75] GOBËL (L.)
1ere réunion annuelle de l'EGAS, Orsay, 1969.

- [76] ALEKSEEV (N.I.) et KAMINSKII (D.L.)
Soviet. Phys. Techn. Phys., 1965, 9, 1177.
- [77] CAMUS (P.) et BLAISE (J.)
C.R. Acad. Sc., 1965, 261, 4359.
- [78] READER (J.) et SUGAR (J.)
J. Opt. Soc. Amer., 1966, 56, 1189.
- [79] BEUTLER (H.)
Z. Physik, 1935, 93, 177.
- [80] FANO (U.)
Nuovo Cimento, 1935, 12, 156.
- [81] FANO (U.) et COOPER (J.W.)
Rev. Mod. Physics, 1968, 40, 441.
- [82] CONWAY (J.C.) et WORDEN (E.F.)
Lawrence Radiation Laboratory, Rapport UCRL - 19944, 1970.

E R R A T A

| <u>Pages</u> | <u>Lignes</u> | <u>Lire</u> |
|--------------|---------------|---|
| 2 | 24 | ..., nous a permis |
| 8 | 11 | Un spectromètre SISAM ... |
| 10 | 9 | $2I+1$ |
| 15 | 6 | $J < J'$ |
| 15 | 21 | ..., l'effet Zeeman ... |
| 15 | 24 | ..., l'effet Zeeman |
| 22 | 21 | ... lèvent la dégénérescence |
| 23 | 10 | dans [12] . Les R^k interviennent ... |
| 34 | 4 | ... comme combinaisons linéaires ... |
| 40 | 14 | Finalement quelque 2600 raies ... |
| 44 | 10 | où N est le nombre ... |
| 76 | 5 | ..., 162 niveaux impairs ... |
| 113 | 9 | ... à le souligner, ... |
| 115 | 15 | où $N_{j'}$ est ... |
| 115 | 19 | où $g_{j'}$ est ... |
| 124 | 14 | ... configurations homologues de celles trouvées |
| 124 | 25 | Quelque 7000 raies |
| 149 | 19 | ... paramètre L_1 ($12\sqrt{70} L^1$), ... |
| 183 | 23 | où T est la limite ... |
| 198 | 2 | ... avec la meilleures précision ... |
| 198 | 4 | ... des configurations $f^{13} ds^2, f^{13} d_s^2...$ |
| 214 | 1 | ... est indiqué |

